5. Чисельне інтегрування функцій

5.1. Постановка задачі

Задача чисельного інтегрування полягає в знаходженні наближеного значення інтеграла:

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

де $f(x)$ — задана функція. Для розв'язання цієї задачі відрізок $[a,b]$ зазвичай розбивається на n елементарних відрізків точками $a=x_0<x_1<x_2<\ldots<x_n=b$ і шукане значення інтеграла замінюється сумою:

$$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n-1} I_i(f)=\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx. \qquad (1)$$

На кожному елементарному відрізку $[x_i,x_{i+1}]$ вводиться сітка $x_i=\xi_{i,0}<\xi_{i,1}<\xi_{i,2}<\ldots<\xi_{i,m}=x_{i+1}$ і як наближене значення інтеграла розглядається число

$$I_i=h_i\sum_{j=0}^{m} c_j f\left(\xi_{i,j}\right), \qquad (2)$$

де $f\left(\xi_{i,j}\right)$ — значення функції $f(x)$ в вузлах $x=\xi_{i,j}$, c_j — вагові множники (ваги), що залежать тільки від вузлів, але не залежать від вибору $f(x)$, $h_i=x_{i+1}-x_i$. Для чисельного наближення визначених інтегралів часто використовується термін квадратура, щоб уникнути плутанини з чисельним інтегруванням звичайних диференціальних рівнянь. Тому формулу (2) називають квадратурною формулою. Число m називають порядком квадратурної формули. Точки $\xi_{i,j}$ називають вузлами, а числа c_j коефіцієнтами квадратурної формули.

Завдання чисельного інтегрування за допомогою квадратур полягає у знаходженні таких вузлів $\xi_{i,j}$ і таких ваг c_j, щоб похибка квадратурної формули

$$R_i=I_i(f)-I_i=\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx-h_i\sum_{j=0}^{m} c_j f\left(\xi_{i,j}\right)$$

була мінімальною. Якщо $R_i=O\left(h_i^{p+1}\right)$, то кажуть, що квадратурна формула має порядок точності p.

Оскільки квадратурна формула (2) повинна бути справедливою для будь-якої функції $f(x)$, в тому числі і для $f(x)\equiv 1$, з формули (2) отримаємо

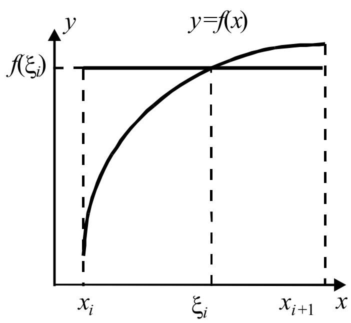
$$\sum_{j=0}^{m} c_j=1.$$

Для побудови формули чисельного інтегрування на всьому відрізку $[a,b]$ достатньо побудувати квадратурну формулу для інтеграла $\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ на елементарному відрізку $[x_i, x_{i+1}]$ і скористатися властивістю (1). Формулу (1) називають складеною квадратурною формулою. Похибка складеної квадратурної формули R_n дорівнює сумі похибок квадратурної формули на елементарних відрізках:

$$R_n = I(f) - \sum_{i=0}^{n-1} I_i = \sum_{i=0}^{n-1} R_i .$$

5.2. Формула прямокутників (не розглядається)

Нехай $[a,b]$ — скінчений інтервал осі x, який розбито на n елементарних відрізків $[x_i, x_{i+1}], i=\overline{0,n\text{-}1}$. Припустимо, що $x_0=a$, $x_n=b$ і $x_0<x_1<x_2<...<x_n$. Позначимо через $h_i=x_{i+1}-x_i$ довжину i-го елементарного відрізка. Нехай $f(x)$ – функція, яка визначена на відрізку $[a,b]$. Як випливає з формули (1), для обчислення інтеграла $\int\limits_a^b f(x)dx$ необхідно розрахувати інтеграл $\int\limits_{x_i}^{x_{I+1}} f(x)dx$.



Как известно из геометрического смысла определенного интеграла, интеграл функции $f(x)$ на отрезке $[x_i,x_{i+1}]$ равен площади фигуры, ограниченной графиком функции $f(x)$, осью $0X$ и прямыми $x=x_i$, $x=x_{i+1}$. При использовании формулы прямоугольников эта площадь аппроксимируется площадью прямоугольника высотой, равной значению функции в средней точке интервала $[x_i,x_{i+1}]$. Пусть $\xi_i = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$, тогда

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx (x_{i+1} - x_i) f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) = h_i f(\xi_i). \tag{3}$$

Формула (3) называется формулой прямоугольников на элементарном отрезке $[x_i, x_{i+1}]$. На основании формулы (3) получаем составную формулу прямоугольников

$$\int\limits_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} h_i f(\xi_i). \tag{4}$$

Геометрический смысл формулы (4) приведен на рис. Определим погрешность квадратурной формулы (3):

$$R_i = R_i(f) = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx - f(\xi_i)h_i. \tag{5}$$

Для этого рассмотрим разложение по формуле Тейлора функции $f(x)$ на элементарном отрезке $[x_i,x_{i+1}]$ относительно центра этого отрезка ξ_i

$$f(x)=f(\xi_i)+(x-\xi_i)f'(\xi_i)+\frac{(x-\xi_i)^2}{2}f''(\xi_i)+ \\ +\frac{(x-\xi_i)^3}{6}f'''(\xi_i)+\frac{(x-\xi_i)^4}{24}f^{(4)}(\xi_i)+\ldots \tag{6}$$

Предположим, что $f(x)$ имеет 5 непрерывных производных и что значения этих производных не очень велики. Эти предположения означают, что остаточный член в (6) обозначенный многоточием, по величине меньше явно выписанных членов. Чтобы проинтегрировать (6) на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ заметим, что

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}}(x-\xi_i)^p\,dx=\begin{cases} h_i, p=0 \\ 0, p=1 \\ \dfrac{h_i^3}{12}, p=2 \\ 0, p=3 \\ \dfrac{h_i^5}{80}, p=4 \end{cases}$$

Отметим, что интегралы нечетных степеней равны нулю. Следовательно,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)=h_i f(\xi_i)+\frac{1}{24}h_i^3 f''(\xi_i)+\frac{1}{1920}h_i^5 f^{(4)}(\xi_i)+\ldots \tag{7}$$

Если h_i мал, то третьим и последующими членами в этом выражении можно пренебречь. Тогда в соответствии с (5):

$$R_i=\frac{1}{24}h_i^3 f''(\xi_i)+\frac{1}{1920}h_i^5 f^{(4)}(\xi_i). \tag{8}$$

Таким образом, на элементарном отрезке формула прямоугольников имеет погрешность $0(h_i^3)$.

Погрешность составной формулы прямоугольников $R_n(f)$ равна сумме погрешностей по всем элементарным отрезкам:

$$R_n(f)=\sum_{i=0}^{n-1}R_i=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h_i^3}{24}f''(\xi_i). \tag{9}$$

Предположим, что все длины элементарных отрезков равны $h_i=h$, $i=\overline{0,n-1}$ Обозначим через M_2 наибольшее значение $f''(\xi_i)$ на отрезке $[a,b]$. Тогда из (9) следует, что

$$R_n(f)\le\frac{M_2 n}{24}h^3=\frac{h^2(b-a)}{24}M_2,\qquad M_2=\sup_{x\in[a,b]}f''(x).$$

Следовательно, погрешность формулы прямоугольников на всем отрезке есть величина $0(h^2)$. В этом случае говорят, что квадратурная формула имеет второй порядок точности.

Замечание: возможны формулы прямоугольников и при ином расположении узлов, например:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} h_i f(x_i), \text{ или} \qquad \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} h_i f(x_{i+1})$$

Однако из-за нарушения симметрии погрешность таких формул на всем отрезке является величиной $O(h^2)$.

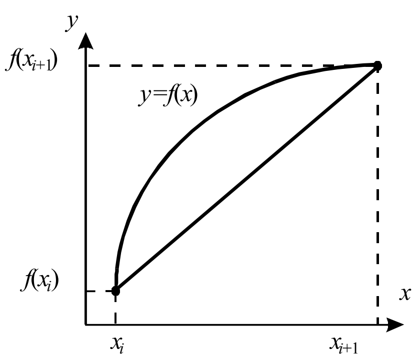
5.3. Формула трапецій (не розглядається)

Для вычисления интеграла функции $f(x)$ на элементарном отрезке $[x_i,x_{i+1}]$ $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$, заменим подынтегральную функцию интерполяционным многочленом первой степени, построенным по узлам x_i, x_{i+1}. По интерполяционной формуле Лагранжа

$$f(x) = \frac{x - x_i}{h_i} f(x_{i+1}) - \frac{x - x_{i+1}}{h_i} f(x_i). \tag{10}$$

Интегрируя (10), получим

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h_i. \tag{11}$$



Геометрически формула (11) означает, что площадь под интегрируемой функцией заменяется площадью трапеции. Поэтому (11) называется формулой трапеций. Составная формула трапеций в случае равенства длин элементарных отрезков $h_i=h$, $i = \overline{0, n-1}$ имеет вид:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h = h(0.5 f_0 + f_1 + f_2 + \ldots + f_{n-1} + 0.5 f_n)$$

где $f_i=f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$

Для определения погрешности формулы трапеций (11) воспользуемся (6) и (7). Подставляя в разложение Тейлора (6) $x=x_i$ и $x=x_{i+1}$, получаем

$$f(x_i) = f(\xi_i) - \frac{1}{2} h_i f'(\xi_i) + \frac{1}{8} h_i^2 f''(\xi_i) - \frac{1}{48} h_i^3 f'''(\xi_i) + \frac{1}{384} h_i^4 f^{(4)}(\xi_i) - \ldots$$

$$f(x_{i+1}) = f(\xi_i) + \frac{1}{2} h_i f'(\xi_i) + \frac{1}{8} h_i^2 f''(\xi_i) + \frac{1}{48} h_i^3 f'''(\xi_i) + \frac{1}{384} h_i^4 f^{(4)}(\xi_i) + \ldots$$

где $\xi_i = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$.

Откуда, пренебрегая малыми высших порядков, получим

$$\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} = f(\xi_i) + \frac{1}{8} h_i^2 f''(\xi_i) + \frac{1}{384} h_i^4 f^{(4)}(\xi_i)$$

Следовательно

$$f(\xi_i) = \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2} - \frac{1}{8}h_i^2 f''(\xi_i) - \frac{1}{384}h_i^4 f^{(4)}(\xi_i)$$

Подставляя последнее выражение в (7), получим

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}h_i - \frac{1}{12}h_i^3 f''(\xi_i) - \frac{1}{480}h_i^5 f^{(4)}(\xi_i) + \ldots$$

Тогда

$$R_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx - \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}h_i = -\frac{1}{12}h_i^3 f''(\xi_i) - \frac{1}{480}h_i^5 f^{(4)}(\xi_i) \qquad (12)$$

Или считая h_i малой величиной и пренебрегая малыми высших порядков, получим

$$R_i = -\frac{1}{12}h_i^3 f''(\xi_i)$$

Обозначив через M_2 наибольшее значение $f''(x)$ на отрезке $[a,b]$, т.е. $M_2 = \sup\limits_{x\in[a,b]} f''(x)$, и предположив равенство элементарных отрезков, найдем погрешность составной формулы трапеций

$$R_n(f) = \sum_{i=0}^{n-1} R_i = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{12}h_i^3 f''(\xi_i) \le \frac{M_2 nh^3}{12} = \frac{h^2(b-a)}{12}M_2$$

Таким образом, формула трапеций так же, как и формула прямоугольников на элементарном отрезке имеет погрешность $O(h_i^3)$, а на всем отрезке имеет второй порядок точности. Поэтому при использовании и той, и другой формулы удвоение числа элементарных отрезков приблизительно учетверяет точность. Следует отметить, что хотя формула трапеций использует более высокий порядок интерполяционного полинома для подынтегральной функции (первый, а формула прямоугольников — второй), но, как следует из сравнений формул (8) и (12), ее погрешность в два раза больше.

Мы вскоре рассмотрим другие формулы, для которых погрешность выражается более высокими степенями h_i, так что множитель 2 не имеет большого значения. И все же это многим кажется удивительным. На практике, как мы увидим при выводе апостериорной оценки погрешности методом Рунге, важен лишь показатель степени при h_i. А в этом смысле обе формулы имеют одинаковый результат.

5.4. Формула Сімпсона (парабол) (не розглядається)

Для вычисления $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ найдем значение функции $f(x)$ в средней точке интервала $[x_i,x_{i+1}]$ $f(\xi_i)$, где $\xi_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$. Заменим функцию $f(x)$ на элементарном отрезке $[x_i,x_{i+1}]$ интерполяционным полиномом Лагранжа, проходящим через точки $(x_i, f(x_i)), (\xi_i, f(\xi_i)), (x_{i+1}, f(x_{i+1}))$:

$$f(x)=\frac{(x-\xi_i)(x-x_{i+1})}{(x_i-\xi_i)(x_i-x_{i+1})}f(x_i)+\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(\xi_i-x_i)(\xi_i-x_{i+1})}f(\xi_i)+$$

$$+\frac{(x-x_i)(x-\xi_i)}{(x_{i+1}-x_i)(x_{i+1}-\xi_i)}f(x_{i+1})= \qquad (13)$$

$$=\frac{2}{h_i^2}((x-\xi_i)(x-x_{i+1})f(x_i)-2(x-x_i)(x-x_{i+1})f(\xi_i)+(x-x_i)(x-\xi_i)f(x_{i+1}))$$

Интегрируя (13), получим

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx=\frac{h_i}{6}(f(x_i)+4f(\xi_i)+f(x_{i+1})) \qquad (14)$$

Формулу (14) называют формулой Симпсона или формулой парабол. На всем отрезке $[a,b]$ в соответствии с (1) формула Симпсона имеет вид

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h_i}{6}(f(x_i)+4f(\xi_i)+f(x_{i+1})). \qquad (15)$$

На равномерной сетке, когда $h_i=h_{i+1}=h,\ i=\overline{0,n-1}$, формула (15) примет вид

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{h}{6}(f(a)+f(b)+2(f(x_1)+f(x_2)+\ldots+f(x_{n-1}))+$$
$$+4(f(\xi_1)+f(\xi_2)+\ldots+f(\xi_{n-1})) \qquad (16)$$

Чтобы не использовать переменную ξ, можно обозначить $x_i=a+\frac{h}{2}i,\ f_i=f(x_i), i=\overline{0,2n}, hn=b-a$. Тогда формула (16) примет вид

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{6n}(f(a)+f(b)+2(f_2+f_4+\ldots+f_{2n-2})+$$
$$+4(f_1+f_3+\ldots+f_{2n-1}) \qquad (17)$$

Для определения погрешности формулы Симпсона представим формулу (14) в виде

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx=\frac{2}{3}f(\xi_i)h_i+\frac{1}{3}\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}h_i \qquad (18)$$

Тогда в соответствии с (18) погрешность квадратурной формулы (13) можно представить в виде

$$R_i=\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx-\frac{h_i}{6}(f(x_i)+4f(\xi_i)+f(x_{i+1}))=$$
$$=\frac{2}{3}(\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx-f(\xi_i)h_i)+\frac{1}{3}(\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx-\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}h_i) \qquad (19)$$

Но выражение перед множителем 2/3 есть погрешность формулы прямоугольников, определяемое (8), а перед 1/3 погрешность формулы трапеций определяемое (12). Подставляя (8) и (12) в (19) получим

$$R_i = -\frac{1}{2880} h_i^5 f^{(4)}(\xi_i)$$

Таким образом, на элементарном отрезке формула Симпсона имеет погрешность O(h_i^5). Поскольку в выражение погрешности входит четвертая производная, то формула Симпсона оказывается абсолютно точна для любых кубических функций для которых $f^{(4)}(x) \equiv 0$.

Погрешность составной формулы Симпсона (17) оценивается как

$$R_n(f) < \frac{h^4(b-a)}{2880} M_4, \quad \text{где } hn = b-a, M_4 = \sup_{x\in[a,b]} \left| f^{(4)}(x) \right|$$

Отсюда видно, что формула Симпсона существенно точнее, чем формулы прямоугольников и трапеций.

5.5. Формули Ньютона-Котеса

Формули Ньютона-Котеса – це сімейство квадратурних формул, які отримують інтеграцією інтерполяційних поліномів, що побудовані на сітці з рівновіддаленими вузлами. Формули прямокутників, трапецій і Сімпсона отримують інтеграцією поліномів відповідно нульового, першого та другого степеня і є першими трьома членами цієї родини.

Розрізняють два типи формул Ньютона-Котеса: формули замкненого типу та формули відкритого типу. У формулах замкненого типу інтерполяційний поліном проходить через крайні точки відрізка $\left[x_i, x_{i+1}\right]$, а в формулах відкритого типу хоча б одна з точок x_i або x_{i+1} не є вузлом інтерполяційного полінома. Так, наприклад, формули трапеції і Сімпсона є формулами Ньютона-Котеса замкненого типу, а формула прямокутника - відкритого типу.

Розглянемо побудову формули Ньютона-Котеса m-го порядку закритого типу. Для цього розіб'ємо елементарний відрізок $\left[x_i, x_{i+1}\right]$ на m рівних частин і обчислимо значення функції в точках розбиття $f\left(\xi_{i,j}\right)$, де $\xi_{i,j} = x_i + j\frac{h_i}{m}, j = \overline{0,m}$. Побудуємо інтерполяційний поліном Лагранжа на відрізку $\left[x_i, x_{i+1}\right]$ з вузлами $\left(\xi_{i,j}, f\left(\xi_{i,j}\right)\right)$, $j = \overline{0,m}$:

$$f\left(x\right) \approx P_m\left(x\right) = \sum_{j=0}^{m} \prod_{k=0,k\neq j}^{m} \frac{x - \xi_{i,k}}{\xi_{i,j} - \xi_{i,k}} f_{i,j} = \sum_{j=0}^{m} \frac{\left(-1\right)^{m-j}}{j!\left(m-j\right)!} \prod_{k=0,k\neq j}^{m} \left(t-k\right) f_{i,j}, \qquad (20)$$

де $f_{i,j} = f\left(\xi_{i,j}\right) = f\left(x_i + j\frac{h_i}{m}\right), t = \frac{x - x_i}{\frac{h_i}{m}}$.

Тоді, інтегруючи функцію (20) і виконуючи заміну змінних $x = x_i + t\frac{h_i}{m}, dx = \frac{h_i}{m}dt$, отримаємо:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(x\right)dx = h_i \sum_{j=0}^{m} c_j f_{i,j} \qquad (21)$$

де c_j — коефіцієнти Котеса, що дорівнюють

$$c_j = \frac{\left(-1\right)^{m-j}}{j!\left(m-j\right)!} \frac{1}{m} \int_0^m \prod_{k=0,k\neq j}^{m} \left(t-k\right)dt. \qquad (22)$$

Формулу (21) називають квадратурною формулою Ньютона-Котеса. З формули (22) випливає, що коефіцієнти Котеса c_j не залежать від функції $f\left(x\right)$. Тоді вважаючи, що $f\left(x\right) \equiv 1$, з формули (21) маємо:

$$\sum_{j=0}^{m} c_j = 1. \qquad (23)$$

Крім цього з формули (22) випливає, що

$$c_j = c_{m-j}\,. \qquad (24)$$

Отже, коефіцієнти Котеса є симетричними відносно центра елементарного відрізка.

Оцінимо похибку квадратурної формули Ньютона-Котеса (21). Враховуючи, що похибка інтерполяції функції $f(x)$ поліномом $P_m(x)$ на відрізку $[x_i, x_{i+1}]$ дорівнює:

$$f(x) - P_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\theta_i)}{(m+1)!} Q_{m+1}(x),$$

де $\theta_i \in [x_i, x_{i+1}]$, $Q_{m+1}(x) = \prod_{k=0}^{m}(x - \xi_{i,k})$, маємо:

$$R_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f^{(m+1)}(\theta_i)}{(m+1)!} Q_{m+1}(x)\,dx = \frac{f^{(m+1)}(\theta_i)}{(m+1)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \prod_{k=0}^{m}(x - \xi_{i,k})\,dx\,.$$

Проводячи під час інтегрування заміну змінних $x = \frac{h_i}{m} t + x_i$, $dx = \frac{h_i}{m} dt$, отримаємо:

$$R_i = \frac{f^{(m+1)}(\theta_i)}{(m+1)!} \left(\frac{h_i}{m}\right)^{m+2} \int_0^m \prod_{k=0}^{m}(t-k)\,dt\,. \qquad (25)$$

З формули (25) випливає, що якщо функція $f(x)$ є поліномом степені m, то $f^{(m+1)}(\theta_i) \equiv 0$ і $R_i = 0$. Отже, квадратурна формула Ньютона-Котеса порядку m є абсолютно точною, щонайменше, для полінома степеня m. Покажемо, що якщо m парне, то квадратурна формула Ньютона-Котеса є абсолютно точною для поліномів степеня $(m+1)$. Для цього виконаємо в інтегралі формули (25) заміну змінних: $s = \frac{m}{2} - t$. Тоді

$$\int_0^m \prod_{k=0}^{m}(t-k)\,dt = \int_{-\frac{m}{2}}^{\frac{m}{2}} \prod_{k=0}^{m}\left(\frac{m}{2} - k - s\right) ds =$$

$$= -\int_{-\frac{m}{2}}^{\frac{m}{2}} s \prod_{k=0}^{\frac{m}{2}-1}\left(-s - \left(\frac{m}{2} - k\right)\right)\left(-s + \left(\frac{m}{2} - k\right)\right) ds =$$

$$= -\int_{-\frac{m}{2}}^{\frac{m}{2}} s \prod_{k=0}^{\frac{m}{2}-1}\left(s^2 - \left(\frac{m}{2} - k\right)^2\right) ds$$

Останній інтеграл дорівнює нулю як інтеграл від непарної функції на симетричному відрізку. Отже, для парного m $R_i = 0$ навіть якщо $f^{(m+1)}(\theta_i) \neq 0$, тобто функція $f(x)$ є поліномом степеня більше, ніж m. Оцінка похибки квадратурної формули Ньютона-Котеса для парних m може бути отримана як

$$R_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f^{(m+2)}(\theta_i)}{(m+2)!} Q_{m+2}(x)\,dx = a_i f^{(m+2)}(\theta_i) h_i^{m+3}\,,$$

де a_i – стала.

Таким чином, похибка формули Ньютона-Котеса може бути оцінена як

$$R_i = \begin{cases} a_i f^{(m+2)}(\theta_i) h_i^{m+3}, & m = 2l \\ a_i f^{(m+1)}(\theta_i) h_i^{m+2}, & m = 2l-1 \end{cases}, \quad l = 1, 2, \ldots \quad . \tag{26}$$

Слід підкреслити, що формули Ньютона-Котеса парного порядку за рахунок симетрії розбиття елементарного відрізка набувають додаткового порядок точності. З цієї причини найбільш часто застосовуються формули парного порядку.

З виразу (26) випливає, що для зменшення похибки квадратурної формули Ньютона-Котеса необхідно збільшувати її порядок. Однак формули з $m \ge 10$ рідко використовуються через їх чисельну нестійкість, яка призводить до різкого зростання обчислювальної похибки. Причиною такої нестійкості є те, що коефіцієнти c_j формули (21) для великих порядків m мають різні знаки. Деякі коефіцієнти стають від'ємними для $m = 8$. Якщо $m = 9$, то всі коефіцієнти є додатними, але для $m \ge 10$ існують як додатні, так і від'ємні значення.

Зупинимося докладніше на значенні знакосталості коефіцієнтів для стійкості обчислень. Припустимо, що значення функції $f(x)$ обчислюються з деякою похибкою Δf. У відповідності до формули (21) отримаємо наближене значення квадратури:

$$\tilde{I}_i = \sum_{j=0}^{m} c_j \left(f_{i,j} + \Delta f_{i,j} \right).$$

Тоді обчислювальна похибка обчислення інтеграла дорівнює:

$$\Delta I = \sum_{j=0}^{m} c_j \Delta f_{i,j} .$$

Звідки отримуємо оцінку:

$$\left|\Delta I\right| \le \sum_{j=0}^{m} \left|c_j\right| \left|\Delta f_{i,j}\right|.$$

Якщо всі ваги c_j є додатними, то відповідно до формули (23) $\sum_{j=0}^{m} \left|c_j\right| = 1$. Тоді

$$\left|\Delta I\right| \le \sum_{j=0}^{n} \left|c_j\right| \left|\Delta f_{i,j}\right| \le \max_{0\le j\le m} \left|\Delta f_{i,j}\right| \sum_{j=0}^{m} \left|c_j\right| = \max_{0\le j\le m} \left|\Delta f_{i,j}\right|.$$

Отже, похибка обчислення квадратури має той же порядок, що і похибка обчислення функції. У цьому випадку говорять, що сума (21) обчислюється стійко. Якщо коефіцієнти c_j мають різні знаки, то може виявитися, що сума $\sum_{j=0}^{m} \left|c_j\right|$ може збільшуватися зі зростанням m, а отже, зростає похибка обчислення квадратури.

Коефіцієнти і залишкові члени формул Ньютона-Котеса перших 10-ти порядків наведено в таблиці.

Таблиця 1. Сталі для розрахунку коефіцієнтів Котеса і похибка формули Ньютона-Котеса порядку *m*

m	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	$\sum_{i=0}^{m}\alpha_i$	R_i
1	1	1					2	$-\frac{1}{12}h_i^3 f''(\xi)$
2	1	4	1				6	$-\frac{1}{90\cdot 2^5}h_i^5 f^{IV}(\xi)$
3	1	3	3	1			8	$-\frac{3}{80\cdot 3^5}h_i^5 f^{IV}(\xi)$
4	7	32	12	32	7		90	$-\frac{8}{945\cdot 4^7}h_i^7 f^{VI}(\xi)$
5	19	75	50	50	75	19	288	$-\frac{275}{12096\cdot 5^7}h_i^7 f^{VI}(\xi)$
6	41	216	27	272	27	216	840	$-\frac{9}{1400\cdot 6^9}h_i^9 f^{VIII}(\xi)$
7	751	3577	1323	2989	2989	1323	17280	$-\frac{8183}{518400\cdot 7^9}h_i^9 f^{VIII}(\xi)$
8	989	5888	–928	10496	–4540	10496	28350	$\sim h_i^{11} f^{X}(\xi)$
9	2857	15741	1080	19344	5778	5778	89600	$\sim h_i^{11} f^{X}(\xi)$
10	16067	106300	–48525	272400	–260550	427368	598752	$\sim h_i^{13} f^{XII}(\xi)$

Коефіцієнти Котеса розраховуються за формулою:

$$c_i = \frac{\alpha_i}{\sum_{i=1}^{m}\alpha_i}.$$

Для визначення відсутніх коефіцієнтів необхідно скористатися властивістю (24).

5.6. Апостеріорна оцінка похибки квадратурної формули. Правила Рунге

Нехай похибка квадратурної формули на елементарному відрізку $[x_i, x_{i+1}]$ оцінюється виразом

$$R_i = a_i h_i^{p+1} f^{(p)}(\theta_i) \tag{27}$$

де $\theta_i \in [x_i, x_{i+1}]$. Оцінка (27) вказує, що квадратурна формула дає точний результат, якщо інтегрована функція є поліном степеня менш, ніж *p*–1, для якого $f^{(p)}(\theta_i) \equiv 0$. З оцінки (27) випливає, що величина похибки чисельного інтегрування залежить як від кроку сітки h_i, так і від гладкості підінтегральної функції $f(x)$, оскільки в оцінку входить похідна $f^{(p)}(\theta_i)$. Значення похідної $f^{(p)}(x)$ може сильно змінюватися від точки до точки і, взагалі кажучи, заздалегідь невідомо. Якщо похибка велика, то її можна зменшити шляхом подрібнення сітки на даному відрізку $[x_i, x_{i+1}]$. Але для цього, перш за все, потрібно вміти апостеріорно, тобто після проведення розрахунку, оцінювати похибку.

Апостеріорну оцінку похибки можна здійснити методом Рунге. Для цього позначимо через I_i — точне значення інтеграла $\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$. Нехай квадратурна формула на відрізку $\left[x_i, x_{i+1}\right]$ дає оцінку інтеграла, що дорівнює $I_{h,i}$. Згідно оцінки (27) маємо:

$$I_i - I_{h,i} = A_i h_i^{p+1} \tag{28}$$

де A_i залежить від гладкості функції $f\left(x\right)$ і заздалегідь невідома. Подрібнимо на відрізку $\left[x_i, x_{i+1}\right]$ сітку в q разів і повторимо розрахунок з кроком $\frac{h}{q}$. Отримаємо оцінку інтеграла $I_{h/q,i}$. На кожному з q підінтервалів $\left[x_i,\ x_i + \frac{h_i}{q}\right], \left[x_i + \frac{h_i}{q},\ x_i + 2\frac{h_i}{q}\right], \ldots, \left[x_i + (q-1)\frac{h_i}{q},\ x_{i+1}\right]$ похибка у відповідності з формулою (28) буде дорівнювати $A_i\left(\frac{h_i}{q}\right)^{p+1}$. Тоді сумарна похибка обчислення з кроком $\frac{h_i}{q}$ дорівнює:

$$I_i - I_{h/q,i} = qA_i\left(\frac{h_i}{q}\right)^{p+1} = A_i\frac{h_i^{p+1}}{q^p}. \tag{29}$$

Із співвідношень (28) та (29) можна вилучити константу A_i і отримати оцінку похибки, яка містить лише відомі величини $I_{h,i}$, $I_{h/q,i}$. Дійсно, віднімаючи з виразу (28) рівність (29), отримаємо:

$$I_{h/q,i} - I_{h,i} = A_i h_i^{p+1}\frac{q^p - 1}{q^p}.$$

Звідки маємо:

$$A_i = \left(I_{h/q,i} - I_{h,i}\right)\frac{q^p}{h_i^{p+1}\left(q^p - 1\right)}.$$

Підставляючи вираз для A_i у рівняння (29) отримаємо:

$$I_i - I_{h/q,i} = \frac{I_{h/q,i} - I_{h,i}}{q^p - 1}. \tag{30}$$

Однак, $I_i - I_{h/q,i}$ — є похибкою обчислення інтеграла з кроком $\frac{h_i}{q}$. Отже, вираз (30) можна переписати у вигляді:

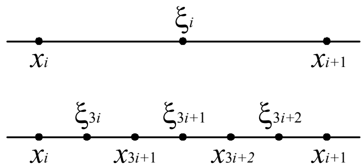
$$R_i = \frac{I_{h/q,i} - I_{h,i}}{q^p - 1}. \tag{31}$$

Формула (31) виражає перше правило Рунге, з якого випливає, що для оцінки похибки інтеграла з кроком $\frac{h_i}{q}$ достатньо знати різницю обчислених квадратур з кроком $\frac{h_i}{q}$ і в q разів більшим h_i.

Застосуємо правило Рунге (31) для оцінки похибки складеної квадратурної формули (1):

$$R_{qn} = \sum_{i=0}^{n-1} R_{qi} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} I_{h/q,i} - \sum_{i=0}^{n-1} I_{h,i}}{q^p - 1} = \frac{I_{qn} - I_n}{q^p - 1}, \tag{32}$$

де I_{qn}, I_n — оцінки інтеграла на відрізку $[a,b]$, обчислені за складеною квадратурною формулою у випадках розбиття відрізка $[a,b]$ на qn і n елементарних відрізків.



Слід зазначити, що під час апостеріорної оцінки похибки чисельного інтегрування для зменшення обчислення значень $f(x)$ величину q обирають так, щоб вузли квадратурної формули з кроком h_i збігалися з тими, що отримано з кроком $\frac{h_i}{q}$. Так, наприклад, у разі використання формули прямокутників зручно вибрати $q = 3$ (рис.) за якої $\xi_i = \xi_{3i+1}$. Під час використання формул трапецій і Сімпсона обирають $q = 2$.

Може виявитися, що порядок точності p якоїсь квадратурної формули невідомий. В цьому випадку для апостеріорної оцінки похибки необхідно провести обчислення трьох оцінок $I_{h,i}, I_{h/q_1,i}, I_{h/q_2,i}$, відповідно з кроками h, $\frac{h}{q_1}$, $\frac{h}{q_2}$. Тоді відповідно до виразу (28) маємо:

$$I_i - I_{h/q_1,i} = q_1 A_i \left(\frac{h_i}{q_1}\right)^{p+1} = A_i \frac{h_i^{p+1}}{q_1^p}, \tag{33}$$

$$I_i - I_{h/q_2,i} = q_2 A_i \left(\frac{h_i}{q_2}\right)^{p+1} = A_i \frac{h_i^{p+1}}{q_2^p}. \tag{34}$$

З рівнянь (28), (33) та (34) можна виключити сталі A_i та p і отримати оцінку похибки, яка містить лише відомі величини $I_{h,i}, I_{h/q_1,i}, I_{h/q_2,i}$. Найпростіше це зробити якщо $q_1 = q$, $q_2 = q^2$. Тоді, віднімаючи від (33) рівняння (28) та від (34) рівняння (33), отримаємо:

$$I_{h,i} - I_{h/q_1,i} = A_i h_i^{p+1} \frac{q^p - 1}{q^p}, \tag{35}$$

$$I_{h/q,i} - I_{h/q^2,i} = A_i h_i^{p+1} \frac{1}{q^p} \frac{q^p - 1}{q^p}. \tag{36}$$

Розділивши рівняння (35) на (36), отримаємо:

$$q^p = \frac{I_{h,i} - I_{h/q,i}}{I_{h/q,i} - I_{h/q^2,i}}. \quad (37)$$

Звідки маємо:

$$p = \frac{\ln\left(\dfrac{I_{h,i} - I_{h/q,i}}{I_{h/q,i} - I_{h/q^2,i}}\right)}{\ln q}. \quad (38)$$

Формули (37) і (38) виражають друге правило Рунге, яке дозволяє апостеріорно визначити порядок точності квадратурної формули. Підстановка (37) у (31) і (32) дозволяє апостеріорно визначити похибку квадратурної формули.

5.7. Загальна похибка чисельного інтегрування

Нехай значення інтеграла визначається за складеною квадратурною формулою (1), яка має похибку R_n. Тоді загальна похибка обчислення інтеграла дорівнює сумі похибки квадратурної формули R_n і обчислювальної похибки квадратури ΔI_n:

$$\Delta I_\Sigma = \Delta I_n + R_n.$$

Обчислювальна похибка квадратурної формули пов'язана з похибкою визначення ваг Δc_i і похибки обчислення функції $f(x)$ у вузлах. Тоді відповідно до формули визначення загальної похибки обчислення функції за відомими похибками аргументів обчислювальна похибка квадратури (1) дорівнює:

$$\Delta I_n = \sum_{i=0}^{n-1} \left(\max\left| f(x_i) \right| \Delta c_i + c_i \max\left| \frac{df(x_i)}{dx} \right| \Delta x_i \right), \quad (39)$$

де Δc_i — абсолютна похибка ваг, Δx_i — абсолютна похибка вузлів.

Нехай відносна похибка заокруглення дійсних чисел дорівнює $\varepsilon_{маш}$. Тоді якщо похибка визначення ваг і вузлів пов'язана тільки з похибкою заокруглення, то $\Delta c_i = \varepsilon_{маш} c_i$, $\Delta x_i = \varepsilon_{маш} x_i$. Отже, для похибки (39) можна отримати оцінку:

$$\Delta I_n \le n\varepsilon_{маш}\left(A_1 + A_2\right) = nA\varepsilon_{маш},$$

де $A_1 \ge c_i \max\left| f(x_i) \right|, \forall i = \overline{0,n}$, $A_2 \ge c_i x_i \max\left| \dfrac{df(x_i)}{dx} \right|, \forall\, i = \overline{0,n}$, $A = A_1 + A_2$.

Таким чином, обчислювальна похибка квадратурної формули лінійно зростає зі збільшенням кількості вузлів.

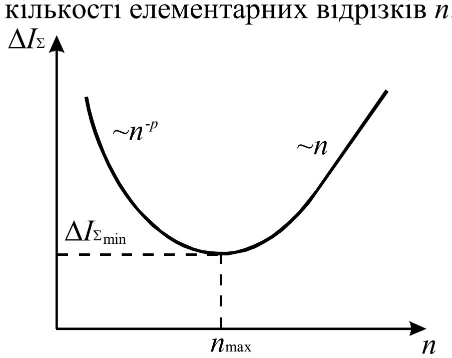
Похибка квадратурної формули R_n оцінюється як:

$$R_n \le B_1 h^p$$

де p — стала, що визначається порядком квадратурної формули, h — крок сітки. Враховуючи що $h = \dfrac{b-a}{n}$, маємо:

$$R_n \le \frac{B_1 (b-a)^p}{n^p} = \frac{B}{n^p}$$

Таким чином, похибка дискретизації квадратурної формули зменшується з ростом кількості елементарних відрізків n.



Отже, існує абсолютна похибка $\Delta I_{\Sigma\min}$ для будь-якої квадратурної формули, яку не можна зменшити, збільшуючи число кроків n. Конкретне значення $\Delta I_{\Sigma\min}$ залежить від величин A_1, A_2, B_1, a, b, $\varepsilon_{маш}$. Якщо останні можуть бути оцінені, то величини n_{max} і $\Delta I_{\Sigma\min}$ можуть бути знайдені з умови:

$$\frac{dI_\Sigma}{dn} = \frac{d}{dn}\left(A\varepsilon_{маш} n + \frac{B}{n^p} \right) = 0 .$$

Звідки $n_{\max} = \sqrt[p+1]{\dfrac{pB}{A\varepsilon_{маш}}}$

5.8. Поняття про адаптивні квадратурні методи

Параметри методу чисельного інтегрування функцій за квадратурними формулами налаштовуються таким чином, щоб:

1) забезпечувалася необхідна точність обчислення;
2) ефективно використовувалися ресурси часу розрахунків.

Основним регульованим параметром є довжина елементарного відрізка інтегрування h_i. Як випливає з формули (27), для забезпечення високої точності обчислення крок інтегрування слід зменшувати. З іншого боку, для ефективного розв'язання задачі слід використовувати максимально можливий крок інтегрування. Таким чином, величину кроку інтегрування слід вибирати так, щоб задовольняти суперечливим вимогам точності і ефективності. крім цього, величина оптимального кроку інтегрування залежить від характеру інтегрованої функції і може значно змінюватися на відрізку $[a,b]$.

Можливість апостеріорно оцінювати похибку дозволяє обчислювати інтеграл із заданою похибкою $\varepsilon > 0$ шляхом автоматичного вибору кроку інтегрування h_i і відповідного його коригування. Методи, які автоматично визначають крок інтегрування, щоб обчислений результат задовольняв запропонованій точності, називають адаптивними.

Нехай використовується складена квадратурна формула

$$I_n = \sum_{i=0}^{n-1} I_{h,i} ,$$

де $I_{h,i}$ — квадратурна сума на елементарному відрізку, причому на кожному елементарному відрізку використовується одна і та ж квадратурна формула (наприклад, квадратурна формула Ньютона-Котеса m-го порядку). Нехай відомо порядок квадратурної формули p. Проведемо на кожному елементарному відрізку $\left[x_i, x_{i+1}\right]$ всі обчислення двічі, один раз з кроком h_i , і другий раз — с кроком h_i / q і оцінимо похибку за правилом Рунге (31).

Якщо для заданого $\delta > 0$, де δ — абсолютна похибка обчислення інтеграла, будуть виконуватися нерівності:

$$\left|R_i\right| = \frac{\left|I_{h/q,i} - I_{h,i}\right|}{q^p - 1} \le \frac{\delta h_i}{b-a} , i = \overline{0, n-1}, \tag{40}$$

то отримаємо:

$$\left|R_n\right| \le \frac{\delta}{b-a} \sum_{i=0}^{n-1} h_i = \delta .$$

Виконання умови (40) на кожному елементарному відрізку забезпечує отримання розв'язку на всьому відрізку з необхідною похибкою ε.

Якщо ж на якомусь з елементарних відрізків оцінка (40) не виконуватиметься, то крок на цьому відрізку треба подрібнити ще в q разів і знову оцінити похибку. Подрібнення сітки на даному відрізку слід проводити до тих пір, поки не буде досягнута оцінка (40).

Навпаки, якщо оцінка (40) виконується, то необхідно перевірити, чи є можливість рухатися з більш великим кроком. Так, якщо оцінка (40) виконується зі значним запасом, то наступний крок слід зробити більшим. На практиці для визначення кроку інтегрування користуються правилом зон. Якщо на i-му елементарному відрізку досягнута необхідна похибка розв'язку, тобто виконується умова (40), то наступний крок визначається з умови:

$$h_{i+1}=\begin{cases} h_i, & \dfrac{\delta h_i}{q^{p+1}(b-a)}\le R\le\dfrac{\delta h_i}{(b-a)};\\ qh_i, & R<\dfrac{\delta h_i}{q^{p+1}(b-a)}.\end{cases}$$

Нове значення кроку також можна оцінити за формулою:

$$h_{i+1}=\left(\frac{\delta h_i}{R(b-a)}\right)^{\frac{1}{p+1}}h_i \qquad (41)$$

(це випливає з залежності $R\sim h^{p+1}$).

Розрахований за формулою (41) крок здається ближчим до оптимального, проте, загальне число зменшень кроку щоб задовольнити умову (40) часто виявляється більшим, ніж в методі зон.

Існують й інші методи екстраполяції кроку інтегрування. Наприклад, можна обчислити h_{i+1} як значення функції $g(t_i)$, яка інтерполює вузли $(t_k,h_k),k=\overline{j,i},j<i$.

Таким чином, автоматичний вибір кроку інтегрування призводить до того, що інтегрування ведеться з великим кроком на ділянках плавної зміни функції $f(x)$ та з дрібним кроком на ділянках швидкої зміни функції $f(x)$. Це дозволяє для заданої похибки ε зменшити кількість обчислень значень $f(x)$ порівняно з розрахунком на сітці з постійним кроком. Підкреслимо, що знаходження сум $I_{h/q,i}$ параметр q необхідно обирати таким чином, щоб здійснювати обчислення функції лише у нових вузлах.

Слід зазначити, що для деяких функцій $f(x)$ подрібнення кроку може тривати надто довго. Тому у відповідній програмі слід передбачити обмеження зверху на кількість подрібнень, а також можливість збільшення ε.

Якщо порядок точності квадратурної формули p не відомий, то для отримання оцінки (40) необхідно на кожному елементарному відрізку

$[x_i, x_{i+1}]$ всі обчислення проводити тричі з кроками h_i, h_i / q, h_i / q^2 і використати друге правило Рунге (37).

Як правило, для чисельного розв'язання задач задається відносна похибка розв'язку. Однак існують ситуації, коли оцінка лише відносної похибки за правилами Рунґе може призвести до зациклювання програми. Суть явища полягає в тому, що зменшення кроку призводить до того, що права частина нерівності (40) спадає скоріше, ніж оцінка похибки.

Нехай інтегрування ведеться від нуля на відрізку $[0, b]$ та підінтегральна функція дорівнює нулю в точці $x = 0$, $f(0) = 0$. Тоді, якщо квадратурна формула не є абсолютно точною для підінтегральної функції і на першому ж кроці не досягнуто необхідної похибки, а оцінка відносної похибки ведеться за правилом Рунге, то ітерації не закінчаться. Це можна проілюструвати таким прикладом.

Нехай $f(x) = x^2$, а інтегрування ведеться за формулою Ньютона-Котеса нульового порядку (формулою прямокутників) на відрізку $[0, b]$. Тоді на першому відрізку обчислене значення інтеграла $I_1 \approx h \cdot f(h/2) = \dfrac{h^3}{4}$. Похибка формули прямокутників на цьому відрізку становитиме $R_1 = A_1 \cdot h^3$. Запишемо правило (40) для відносної похибки:

$$\varepsilon_1 = \frac{|R_1|}{|I_1|} \le \frac{\varepsilon \cdot h}{b}.$$

Звідси випливає, що умова, яка перевіряється, має вигляд:

$$|R_1| \le \frac{\varepsilon \cdot h}{b} |I_1| \quad \Leftrightarrow \quad A_1 \cdot h^3 \le \frac{\varepsilon \cdot h^4}{4b}.$$

Таким чином, за досить малого h права частина останньої нерівності завжди буде зменшуватися швидше за ліву, і якщо наведена нерівність не виконається на першому кроці, то вже не виконається ніколи і програма зациклиться за нескінченного дроблення кроку.

Очевидний вихід — порушити умову $f(0)=0$. Наприклад, можна проінтегрувати допоміжну функцію $\tilde{f}(x)=f(x)+g(x)$, де $g(x)$ — деяка функція, що легко інтегрується, така, що $g(0)\neq 0$. Тоді

$$I(f)=I(\tilde{f})-I(g).$$

Однак такий підхід не є універсальним і потребує додаткових витрат. На практиці краще поряд з оцінкою відносної похибки оцінювати і абсолютну та закінчувати обчислення на поточному кроці після виконання однієї з вимог. Величина абсолютної похибки розв'язку визначається виходячи з фізичних міркувань для конкретної задачі.

5.9. Екстраполяція Річардсона. Квадратури Ромберга

Припустимо, що для обчислення інтеграла $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(x\right)dx$ використовується квадратурна формула, для якої похибка на елементарному відрізку $\left[x_i, x_{i+1}\right]$ дорівнює:

$$R_i = b_0 h_i^{p+1} + b_1 h_i^{p+2} + \ldots + b_n h_i^{p+n+1} + \ldots,$$

де $b_j = a_j f^{(p+j)}\left(\theta_j\right), \theta_j \in \left[x_i, x_{i+1}\right]$.

Нехай I_i — точне значення інтеграла, а $I_{h,i}$ — оцінка інтеграла за квадратурною формулою з кроком h_i. Тоді, враховуючи, що $R_i = I_i - I_{h,i}$, маємо:

$$I_i = I_{h,i} + b_0 h_i^{p+1} + b_1 h_i^{p+2} + \ldots. \tag{42}$$

Обчислимо оцінку інтеграла з кроком h_i / q . Тоді

$$I_i = I_{h/q,i} + b_0 \frac{h_i^{p+1}}{q^p} + b_1 \frac{h_i^{p+2}}{q^{p+1}} + \ldots. \tag{43}$$

Визначивши з (42), (43) коефіцієнт b_0, отримуємо:

$$I_i = I_{h/q,i} + \frac{I_{h/q,i} - I_{h,i}}{q^p - 1} + \beta_1 \frac{h^{p+2}}{q^{p+1}} + \beta_2 \frac{h^{p+3}}{q^{p+1}} + \ldots, \tag{44}$$

де $\beta_j = b_j (q^p - q^{p+j})$.

З формули (44) випливає, що з оцінок інтеграла за квадратурною формулою, які отримано з кроками h_i і h_i / q, можна отримати нову оцінку інтеграла

$$I_i = I_{h/q,i} + \frac{I_{h/q,i} - I_{h,i}}{q^p - 1}, \tag{45}$$

порядок точності якої збільшується, щонайменше, на 1. Такий спосіб підвищення точності квадратурної формули називають екстраполяцією Річардсона.

Слід зазначити, що формули Ньютона-Котеса містять лише непарні степені h_i у розкладі (42), тобто, $b_1 = b_3 = \ldots = 0$ і $\beta_1 = \beta_3 = \ldots = 0$, оскільки порядок точності p є завжди парним. Тому у разі використання формул Ньютона-Котеса екстраполяція Річардсона збільшує порядок точності квадратурної формули на 2.

Екстраполяцію Річардсон можна продовжити для уточнених значень інтеграла. У цьому випадку ми прийдемо до квадратур Ромберга. Для цього обчислимо оцінки інтеграла за квадратурною формулою на послідовності сіток з кроками $h_0 = h_i$, $h_1 = h_i q^{-1}$, ..., $h_m = h_i q^{-m}$. Для кожного значення h_k отримаємо оцінку $I_{h_k}, k = \overline{0,m}$. Використовуючи формулу (45) екстраполяції Річардсона, обчислимо нові оцінки:

$$I_{h_k}^{(1)} = I_{h_k} + \frac{I_{h_k} - I_{h_{k-1}}}{q^p - 1}, k = \overline{1,m}. \tag{46}$$

Похибка оцінок (46) становить $O\left(h_k^{p+j}\right)$, де j — номер першого ненульового елемента β_j у (45). Для підвищення точності оцінок (46) застосуємо до них екстраполяцію Річардсона:

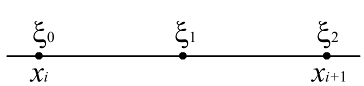
$$I_{h_k}^{(2)} = I_{h_k}^{(1)} + \frac{I_{h_k}^{(1)} - I_{h_{k-1}}^{(1)}}{q^{p+j} - 1}, k = \overline{2,m}. \tag{47}$$

Похибка оцінок (47) вже становить $O(h_k^{p+2j})$. Цей процес підвищення точності можна продовжити, обчислюючи $I_{h_k}^{(i)}$ за рекурентними формулами:

$$I_{h_k}^{(i+1)} = I_{h_k}^{(i)} + \frac{I_{h_k}^{(i)} - I_{h_{k-1}}^{(i)}}{q^{p+ij} - 1}, k = \overline{i+1,m}, i = \overline{1,m-1}. \tag{48}$$

Квадратурні формули, побудовані на основі рекурентних співвідношень (48) називають квадратурами Ромберга. Вперше вони були використані до формул трапецій. Застосування квадратурних формул Ромберга для $m = 1$, $q = 2$ до формули трапецій призводить до формули Сімпсона.

Приклад



Обчислимо інтеграл за формулою трапецій з кроками h та $h/2$ і проведемо екстраполяцію

Річардсона.

$$I_h = h\frac{\left(f_0 + f_2\right)}{2};$$

$$I_{h/2} = \frac{h}{2}\frac{\left(f_0 + f_1\right)}{2} + \frac{h}{2}\frac{\left(f_1 + f_2\right)}{2} = \frac{h}{4}\left(f_0 + 2f_1 + f_2\right);$$

$$I_{h/2}^{(1)} = \frac{h}{4}\left(f_0 + 2f_1 + f_2\right) + \frac{\frac{h}{4}\left[f_0 + 2f_1 + f_2 - 2\left(f_0 + f_2\right)\right]}{2^2 - 1} =$$

$$= \frac{h}{4}\left[f_0 + 2f_1 + f_2 - \frac{f_0 + 2f_1 + f_2 - 2f_0 - 2f_2}{3}\right] = \frac{h}{6}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)$$

Отриманим результатом є формула Сімпсона на відрізку $\left[x_i, x_{i+1}\right]$. Таким чином, екстраполяція Річардсона дозволила підвищити порядок точності з 2 до 4.

У випадках, коли невідомі p або j використовують друге правило Рунге (38).

5.10. Квадратурна формула Чебишова

Шукатимемо квадратурну формулу для інтеграла від функції $f\left(x\right)$ на елементарному відрізку

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(x\right)dx = h_i \sum_{j=0}^{m} c_j f\left(\xi_{ij}\right),$$

де $\xi_{ij} \in \left[x_i, x_{i+1}\right]$

На відміну від формули Ньютона-Котеса, Чебишов запропонував для побудови квадратур задавати не вузли ξ_{ij}, а ваги c_j. Точки $x_i = \xi_{i0} < \xi_{i1} < \ldots < \xi_{im} = x_{i+1}$ слід обирати таким чином, щоб формула була точною для будь-якого алгебраїчного полінома степеня не вище $m+1$. При цьому коефіцієнти c_j задаються так, щоб формула була якомога простішою для обчислень, що буде тоді, коли всі коефіцієнти є рівними між собою, тобто $c_0 = c_1 = c_2 = \ldots = c_m = c$. Тоді

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = h_i c\sum_{j=0}^{m} f(\xi_{ij}). \tag{49}$$

Враховуючи, що формула (49) повинна бути точною для $f(x) \equiv 1$, знаходимо:

$$c = \frac{1}{m+1},$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \frac{h_i}{m+1}\sum_{j=0}^{m} f(\xi_{ij}). \tag{50}$$

Для визначення вузлів ξ_{ij} проведемо у (50) заміну змінних $x = \frac{x_{i+1}+x_i}{2} + \frac{h_i}{2}t$, тоді:

$$\xi_{ij} = \frac{x_{i+1}+x_i}{2} + \frac{h_i}{2}t_j. \tag{51}$$

З формули (49) отримуємо:

$$\int_{-1}^{1} f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2} + \frac{h_i}{2}t\right)dt = \frac{2}{m+1}\sum_{j=0}^{m} f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2} + \frac{h_i}{2}t_j\right). \tag{52}$$

Уведемо позначення $f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2} + \frac{h_i}{2}t\right) = g(t)$. Тоді з формули (52) отримаємо:

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt = \frac{2}{m+1}\sum_{j=0}^{m} g(t_j). \tag{53}$$

Для визначення вузлів t_j використаємо умову, що формула (53) повинна бути точною для поліномів $g(t) = t, t^2, \ldots, t^{m+1}$. Підставляючи ці функції у формулу (53), отримуємо систему рівнянь:

$$
\begin{aligned}
&t_0 + t_1 + \ldots + t_m = 0,\\
&t_0^2 + t_1^2 + \ldots + t_m^2 = \frac{m+1}{3},\\
&t_0^3 + t_1^3 + \ldots + t_m^3 = 0,\\
&t_0^4 + t_1^4 + \ldots + t_m^4 = \frac{m+1}{5},\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&t_0^{m+1} + t_1^{m+1} + \ldots + t_m^{m+1} = \frac{(m+1)(1-(-1)^{m+1})}{2(m+2)}.
\end{aligned}
\tag{54}
$$

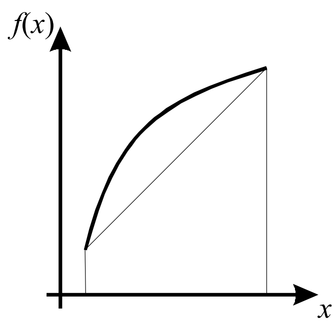
Розв'язуючи систему рівнянь (54), знаходять $t_j, j = \overline{0,m}$, а потім ξ_{ij} за формулою (51).

Відомо, що система рівнянь (54) для $m = 8$ і $m \geq 10$ не має дійсних розв'язків. А отже, методів Чебишова порядків $m = 8$ і $m \geq 10$ не існує.

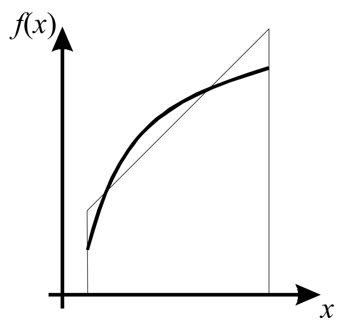
Оскільки квадратурна формула Чебишева є точною для полінома степеня $m+1$, то її похибка не елементарному відрізку не є більшою, ніж

$$R_i = a_i h_i^{m+3} f^{(m+2)}\left(\theta_i\right), \tag{55}$$

де $\theta_i \in [x_i, x_{i+1}]$.



Формула трапеций



Формула Чебышева (m=1)

З формули (55) випливає, що квадратура Чебишова є більш точною, ніж формула Ньютона-Котеса, принаймні, для непарних порядків. Геометрична інтерпретація причини такого явища ілюструється на рис. , де порівнюються формула Ньютона-Котеса 1 порядку (формула трапецій) та формула Чебишова такого ж порядку.

Для $m = 0$ система рівнянь (54) має розв'язок $t_0 = 0$, і формула Чебишова є аналогічною формулі прямокутників (формулі Ньютона-Котеса 0 порядку).

Для $m=1$, маємо: $t_0=-\frac{1}{\sqrt{3}}$, $t_1=\frac{1}{\sqrt{3}}$.

Хоча формула Чебишова є більш точною, ніж формула Ньютона-Котеса непарних порядків, але вимагає більшої кількості обчислень функцій, оскільки у складеній формулі Ньютона-Котеса не перераховуються значення функції у крайніх вузлах.

Нижче наведено t_j для порядків $m=\overline{1,4}$:

$$m=1;\ -t_0=t_1=\frac{1}{\sqrt{3}};$$
$$m=2;\ -t_0=t_2=0,707107;\quad t_1=0;$$
$$m=3;\ -t_0=t_3=0,794654;\ -t_1=t_2=0,187592;$$
$$m=4;\ -t_0=t_4=0,832498;\ -t_1=t_3=0,374541;\ t_2=0.$$

Як приклад обчислимо інтеграл $I=\int_0^1\frac{dx}{1+x^2}$ з попереднього прикладу методом Чебишова третього порядку за одним елементарним відрізком.

Згідно з (52) знайдемо розташування вузлів формули Чебишова:

$$\xi_{0,0}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot\left(-0.794654\right)=0.102673;$$
$$\xi_{0,1}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot\left(-0.187592\right)=0.406204;$$
$$\xi_{0,2}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot 0.187592=0.593796;$$
$$\xi_{0,3}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot 0.794654=0.897327.$$

За формулою (51) обчислимо наближене значення інтегралу:

$$I\approx\frac{1}{4}\left(\frac{1}{1+0,102673^2}+\frac{1}{1+0,406204^2}+\frac{1}{1+0,593796^2}+\frac{1}{1+0,897327^2}\right)\approx$$
$$\approx 0,785303.$$

5.11. Квадратурна формула Гаусса

Шукатимемо квадратурну формулу:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(x\right)dx = h_i \sum_{j=0}^{m} c_j f\left(\xi_{ij}\right), \tag{56}$$

де $\xi_{ij} \in \left[x_i, x_{i+1}\right]$.

На відміну від формул Ньютона-Котеса та Чебишова Гаус запропонував у формулі (56) не вважати заданими ні вузли ξ_{ij}, ні коефіцієнти c_j, а визначити їх так, щоб квадратурна формула була точною для всіх поліномів найвищого можливого степеня.

Отже, вимагатимемо, щоб квадратурна формула (56) була точною для будь-якого алгебраїчного полінома степеня k. Це еквівалентно вимогам, щоб формула була точною для функцій $f(x) = x^{\alpha}, \alpha = 0,1,...,k$. Звідси отримуємо умови:

$$h_i \sum_{j=0}^{m} c_j \xi_{ij}^{\alpha} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} x^{\alpha} dx\,,\ \alpha = \overline{0,k}\,, \tag{57}$$

які є системою із $k+1$ нелінійного рівняння відносно $2m+2$ невідомих $c_j,\ \xi_{ij},\ j = \overline{0,m}$. Система (57) буде сумісною, якщо $k \le 2m+1$. Таким чином, якщо вузли та ваги визначити як розв'язки системи рівнянь (57), то квадратурна формула (56) буде точною для полінома аж до $2m+1$ степеня.

Вузли та ваги квадратурної формули Гауса можна визначити, не вдаючись до безпосереднього розв'язання системи рівнянь (57). Для цього зробимо в формулі (56) заміну змінних:

$$x = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} + \frac{h_i}{2} t\,;\ t = \frac{x - \frac{x_i + x_{i+1}}{2}}{\frac{h_i}{2}}\,,$$

$$\xi_{ij} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} + \frac{h_i}{2} t_j\,. \tag{58}$$

Отримаємо:

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt = 2\sum_{j=0}^{m} c_j g(t_j), \tag{59}$$

де $g(t) = f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} + \frac{h_i}{2}t\right), t_j = \frac{\xi_{ij} - \frac{x_i + x_{i+1}}{2}}{\frac{h_i}{2}}$.

Визначимо ваги c_j з умови, щоб формула (59) була точною принаймні для полінома степеня m. Для цього побудуємо інтерполяційний поліном Лагранжа, що проходить через точки $(t_j, g(t_j)), j = \overline{0,m}$

$$L_m(t) = \sum_{j=0}^{m} g(t_j) \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{m} \frac{t - t_k}{t_j - t_k}.$$

Тоді, підставляючи функцію $g(t) = L_m(t)$ у формулу (59) , отримаємо:

$$c_j = \frac{1}{2}\int_{0}^{1} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{m} \frac{t - t_k}{t_j - t_k} dt. \tag{60}$$

Вузли t_j визначимо таким чином, щоб формула (59) була точною для будь-якого полінома $Q_{2m+1}(t)$ степені $2m+1$. Для цього поліном $Q_{2m+1}(t)$, який проходить через точки $(t_j, g(t_j)), j = \overline{0,m}$ подамо у вигляді суми полінома $S_{2m+1}(t)$, який дорівнює нулю у вузлах $t_j, j = \overline{0,m}$, і полінома $L_m(t)$, який дорівнює $g(t_j)$ у точках $t = t_j$:

$$Q_{2m+1}(t) = S_{2m+1}(t) + L_m(t). \tag{61}$$

Оскільки поліном $S_{2m+1}(t_j) = 0, j = \overline{0,m}$, то його можна подати у вигляді добутку полінома $P_{m+1}(t)$, який дорівнює нулю у точках $t = t_j$ і будь-якого полінома $S_m(t)$ степені m:

$$S_{2m+1}(t) = P_{m+1}(t) S_m(t).$$

Оскільки вузли t_j повинні бути коренями полінома $P_{m+1}(t)$, то його можна подати у вигляді:

$$P_{m+1}(t)=\prod_{j=0}^{m}\left(t-t_j\right). \qquad (62)$$

Підставимо поліном (61) у формулу (59) замість функції $g(t)$. Маємо:

$$\int_{-1}^{1}P_{m+1}(t)S_m(t)dt+\int_{-1}^{1}L_m(t)dt=\sum_{j=0}^{m}2c_jP_{m+1}\left(t_j\right)S_m\left(t_j\right)+\sum_{j=0}^{m}2c_jL_m\left(t_j\right). \qquad (63)$$

Оскільки формула (59) є точною для полінома $L_m(t)$, то $\int_{-1}^{1}L_m(t)dt-\sum_{j=0}^{m}2c_jL_m\left(t_j\right)=0$. Крім цього, з формули (62) випливає, що $P_{m+1}\left(t_j\right)=0$.

Отже, з формули (63) маємо:

$$\int_{-1}^{1}P_{m+1}(t)S_m(t)dt=0. \qquad (64)$$

Умову (64) легко задовольнити, якщо як $P_{m+1}(t)$ обрати поліноми Лежандра, які є ортогональними на відрізку [–1, 1] з вагою $\rho(t)=1$:

$$\int_{-1}^{1}P_l(t)P_k(t)dt=\begin{cases}0 & ,\ l\neq k\\ \dfrac{2}{2l+1} & ,\ l=k\end{cases}.$$

Вони можуть бути розраховані за формулою:

$$P_m(t)=2^{-m}\sum_{j=0}^{\left[\frac{m}{2}\right]}(-1)^j\frac{(2m-2j)!}{j!(m-j)!(m-2j)!}t^{m-2j},$$

або за рекурентними виразами:

$$P_{m+1}(t)=\frac{2m+1}{m+1}tP_m(t)-\frac{m}{m+1}P_{m-1}(t)=tP_m(t)+\frac{t^2}{m+1}\frac{dP_m(t)}{dt},$$

$$P_0(t)=1, P_1(t)=t,$$

$$P_2(t)=\frac{1}{3}\left(3t^2-1\right), P_3(t)=\frac{1}{5}\left(5t^3-3t\right),$$

$$P_4(t)=\frac{1}{33}\left(35t^4-30t^2+3\right).$$

Поліноми Лежандра $P_m(t)$ також можна також обчислити за узагальненою формулою Родріга:

$$P_m(t)=\frac{1}{2^m m!}\frac{d^m}{dt^m}\left(t^2-1\right)^m.$$

Слід також зазначити, що поліном Лежандра $P_{m+1}(t)$ степені $m+1$ є ортогональним до будь-якого багаточлена степені m на відрізку $[-1,1]$ з вагою $\rho(t)=1$.

Таким чином, для того, щоб формула (59) порядка m була точною для полінома степеня $2m+1$ необхідно як вузли t_j обрати корені полінома Лежандра $m+1$ степеня, а ваги обчислити за формулою (60) або за формулою:

$$c_j=\frac{1}{\left(1-t_j^2\right)\left(\frac{dP_{m+1}(t_j)}{dt}\right)^2}.$$

Для використання формули Гауса (56) необхідно перерахувати вузли ξ_{ij} через корені поліномів Лежандра t_j за формулою (58).

Оцінка похибки формули Гауса має вигляд:

$$R_i=\frac{\left((m+1)!\right)^4}{\left((2m+2)!\right)^3\left(2m+3\right)}h^{2m+3}f^{(2m+2)}\left(\theta_i\right). \qquad (65)$$

Можна показати, що корені поліномів Лежандра розташовані симетрично відносно нуля і відповідні ваги збігаються:

$$c_j=c_{m-j}.$$

Слід зазначити, що сума всіх ваг формули Гауса дорівнює 1, тобто $\sum_{j=0}^{m}c_j=1$, і всі ваги є додатними, тобто $c_j>0, j=\overline{0,m}$. Остання властивість гарантує високу стійкість квадратурних формул Гауса високих порядків. Тому найчастіше її застосовують на всьому відрізку $[a,b]$, а не розбивають на елементарні відрізки.

В даний час складено таблиці вузлів і ваг квадратур Гауса, принаймні до $m=4096$ з 20 десятковими знаками. Для $m=0$ формула Гауса збігається з формулою Нютона-Котеса нульового порядку (формулою прямокутників). За $m=1$ формула Гауса збігається з формулою Чебишова першого порядку. З оцінки (65) випливає, що формула Чебишова для $m=1$ мають похибку $O\left(h_i^5\right)$, а не $O\left(h_i^4\right)$, як було показано в попередньому параграфі, тобто раніше ми отримали занижену оцінку.

Деякі значення параметрів формули Гауса для методів 1 – 4-го порядків наведено нижче:

$$m=1:\ -t_0=t_1=\frac{1}{\sqrt{3}}; \qquad c_0=c_1=\frac{1}{2};$$

$$m=2:-t_0=t_2=\sqrt{\frac{3}{5}};t_1=0\ ; \qquad c_0=c_2=\frac{5}{18};c_1=\frac{4}{9}\ ;$$

$$m=3;\ \ -t_0=t_3\cong 0{,}861136; \qquad c_0=c_3\cong 0{,}173928;$$

$$-t_1=t_2\cong 0{,}339981; \qquad c_1=c_2\cong 0{,}326072;$$

$$m=4;\ \ -t_0=t_4\cong 0{,}9061798; \qquad c_0=c_4\cong 0{,}1184634;$$

$$-t_1=t_3=0{,}5384693; \qquad c_1=c_3\cong 0{,}2393143;$$

$$t_2=0; \qquad c_2\cong 0{,}2844444.$$

Обчислимо інтеграл $I=\int\limits_0^1\frac{dx}{1+x^2}$ методом Гауса 3-го порядку за одним елементарним відрізком, $x_0=0,x_1=1$.

$$m=3;\ -t_0=t_3\cong 0{,}861136;\ c_0=c_3\cong 0{,}173928;$$

$$-t_1=t_2\cong 0{,}339981;\ c_1=c_2\cong 0{,}326072.$$

Згідно з (59) знайдемо розташування вузлів формули Гауса:

$$\xi_{0,0}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot\left(-0.861136\right)=0.069432;$$

$$\xi_{0,1}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot\left(-0.339981\right)=0.330010;$$

$$\xi_{0,2}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot 0.339981=0.669991;$$

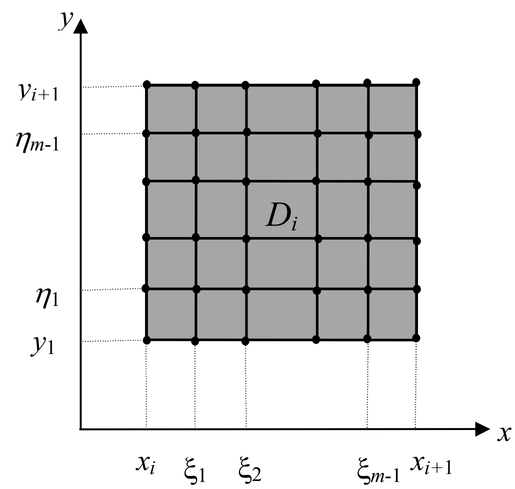
$$\xi_{0,3}=\frac{0+1}{2}+\frac{1-0}{2}\cdot 0.861136=0.930568.$$

Тоді згідно з формулою (57) маємо:

$$I \approx 1 \cdot \left(\begin{array}{l} 0,173928 \cdot \dfrac{1}{1+0,069432^2} + 0,326072 \cdot \dfrac{1}{1+0,330010^2} + \\ +0,326072 \cdot \dfrac{1}{1+0,669991^2} + 0,173928 \cdot \dfrac{1}{1+0,930568^2} \end{array} \right) =$$
$$= 0,785403$$

5.12. Інтегрування функцій декількох змінних

Розглянемо інтеграл від функції декількох змінних $\int\limits_V f\left(\mathbf{X}\right)dV$, де $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^{\mathrm{T}}$ n-вимірний вектор, $dV = dx_1 dx_2 \ldots dx_n$ — елементарний об'єм n-вимірного простору, V — обмежена область в n-вимірному просторі. Найбільш просто обчислити інтеграл, якщо область V вдається розбити на елементарні області V_i, які обмежено координатними поверхнями, що описуються рівняннями $x_i = const$. У цьому випадку квадратурну формулу для інтегрування елементарної області V_i можна отримати на основі квадратурних формул для функції однієї змінної.



Для спрощення розглядатимемо інтегрування функції двох змінних в області D_i, яка є прямокутником (рис.). Для побудови квадратурної формули для інтегралу $\iint\limits_{D_i} f\left(x, y\right)dxdy$ розіб'ємо область D_i сіткою $x_i = \xi_0 < \xi_1 < \ldots < \xi_m = x_{i+1}$, $y_i = \eta_0 < \eta_1 < \ldots < \eta_m = y_{i+1}$ і будемо використовувати одновимірні квадратурні формули порядку m:

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(x\right)dx = h_x \sum_{j=0}^{m} c_j f\left(\xi_j\right);$$

$$\int_{y_i}^{y_{i+1}} f(y)\,dy = h_y \sum_{k=0}^{m} c_k f(\eta_k);$$

де $h_x = x_{i+1} - x_i$, $h_y = y_{i+1} - y_i$.

Тоді

$$\iint_{D_i} f(x,y)\,dx = \int_{y_i}^{y_{i+1}} \left[\int_{y_i}^{x_{i-1}} f(x,y)\,dx \right] dy = \int_{y_i}^{y_{i+1}} \left[h_x \sum_{j=0}^{m} c_j f(\xi_j, y) \right] dy =$$

$$= h_x h_y \sum_{k=0}^{m} c_k \sum_{j=0}^{m} c_j f(\xi_j, \eta_k) = h_x h_y \sum_{j,k=0}^{m} c_j c_k f(\xi_j, \eta_k) =$$

$$= h_x h_y \sum_{j,k=0}^{m} c_{jk} f(\xi_j, \eta_k) = D_i \sum_{j,k=0}^{m} c_{jk} f(\xi_j, \eta_k).$$

Таким чином, всі вагові коефіцієнти двовимірної квадратурної формули визначаються як добуток ваг одномірної квадратури. Так, наприклад, за використання формули Ньтона-Котеса першого порядку (формули трапецій), для якої $c_0 = \frac{1}{2}, c_1 = \frac{1}{2}$, маємо наступну матрицю коефіцієнтів:

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{11} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}$$

Для формули Ньтона-Котеса другого порядку (формули Сімпсона), для якої $c_0 = \frac{1}{6}, c_1 = \frac{4}{6}, c_2 = \frac{1}{6}$, маємо:

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{36} & \frac{4}{36} & \frac{1}{36} \\ \frac{4}{36} & \frac{16}{36} & \frac{4}{36} \\ \frac{1}{36} & \frac{4}{36} & \frac{4}{36} \end{bmatrix}.$$

Використовуючи багатовимірну поліноміальну інтерполяцію, можна побудувати формули Ньютона-Котеса для багатовимірного випадку:

$$\iint_{D_i} f(x,y)\,dx = D_i\left(\sum_{j=0}^{m} c_j f(x_j, y_j) + 0(h^p)\right).$$

де D_i — площа області D_i, h — максимальний крок між вузлами. Значення вагових коефіцієнтів цієї формули для деяких елементарних областей D_i правильної форми надано на рис. 5.1.

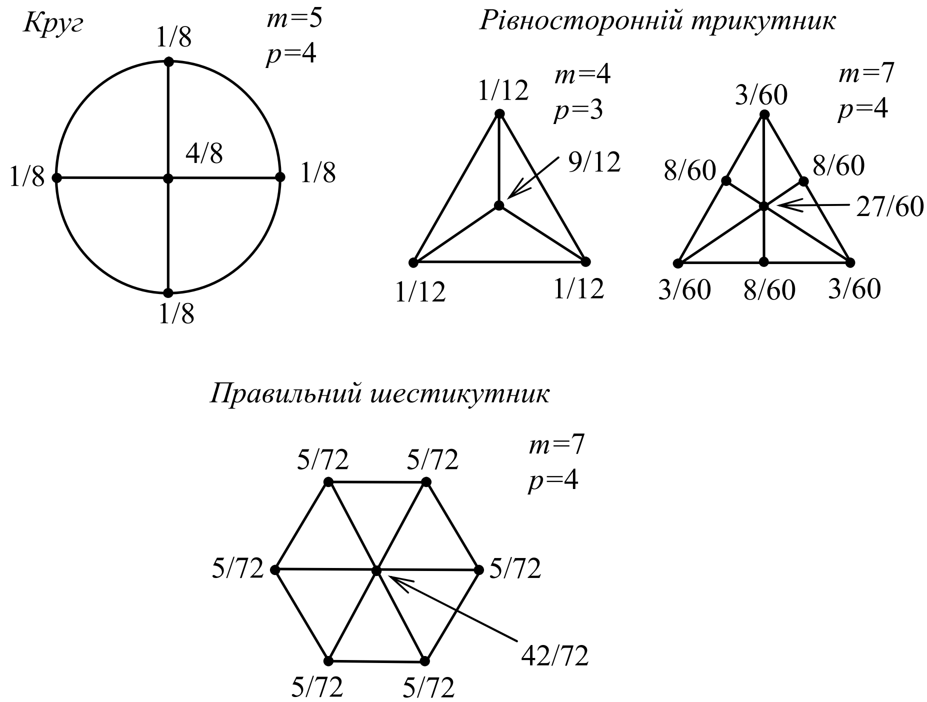
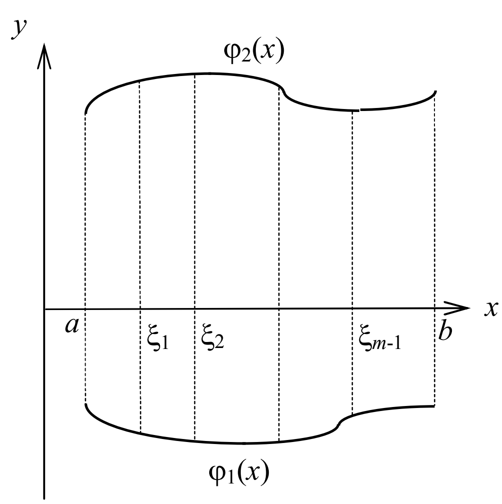


Рис. 5.1. Вагові коефіцієнти багатовимірної формули Ньютона-Котеса для деяких елементарних областей правильної форми.



Розглянемо чисельне інтегрування функцій у складній області. Нехай область D_i задається нерівностями:

$$D_i = \{a \le x \le b, \varphi_1(x) \le y \le \varphi_2(x)\}.$$

Потрібно обчислити інтеграл:

$$I = \iint_{D_i} f(x,y)\,dxdy = \int_{\varphi_1(x)}^{\varphi_2(x)} \int_a^b f(x,y)\,dxdy.$$

Зведення подвійного інтеграла до

повторного дозволяє двічі застосувати одновимірні квадратурні формули. Для цього вихідний інтеграл записуємо у вигляді:

$$g(x)=\int_{\varphi_1(x)}^{\varphi_2(x)} f\left(x,y\right)dy,$$

$$I=\int_a^b g\left(x\right)dx. \qquad (66)$$

Розіб'ємо відрізок $\left[a,b\right]$ сіткою $a=\xi_0<\xi_1<\ldots<\xi_m=b$ і обчислимо інтеграл (66) за одновимірною квадратурною формулою порядку m:

$$I=h_x\sum_{j=0}^{m} c_j g\left(\xi_i\right) \qquad (67)$$

де $h_x=b-a$.

Для обчислення інтегралів $g\left(\xi_i\right)$ кожен із відрізків $\left[\varphi_1\left(\xi_j\right),\varphi_2\left(\xi_j\right)\right]$ розіб'ємо сіткою $\varphi_1\left(\xi_j\right)=\eta_{j0}<\eta_{j1}<\ldots<\eta_{jm}=\varphi_2\left(\xi_j\right)$ і використовуємо одновимірну квадратурну формулу:

$$g\left(\xi_j\right)=\int_{\varphi_1\left(\xi_j\right)}^{\varphi_2\left(\xi_j\right)} f\left(\xi_j,y\right)dy=h_{jy}\sum_{k=0}^{m} c_k f\left(\xi_j,\eta_{jk}\right) \qquad (68)$$

де $h_{jy}=\varphi_2\left(\xi_j\right)-\varphi_1\left(\xi_j\right)$. Об'єднуючи формули (68) і (67), отримаємо квадратурну формулу для двовимірного інтеграла в складній області:

$$\iint_{D_i} f\left(x,y\right)dxdy=h_x\sum_{j=0}^{m} c_j h_{jy}\sum_{k=0}^{m} c_k f\left(\xi_j,\eta_{jk}\right).$$

5.13. Методи Монте-Карло

Методи Монте-Карло обчислення інтегралу $\int_V f\left(\mathbf{X}\right)dV$ ґрунтуються на його оцінці за допомогою середнього значення функції. За визначенням середнє значення функції $f\left(\mathbf{X}\right)$ у багатовимірній ділянці, об'ємом V визначається як

$$\overline{f(\mathbf{X})} = \frac{\int_V f(\mathbf{X})dV}{V}.$$

Отже, оцінку інтеграла $\int_V f(\mathbf{X})dV$ можна отримати як

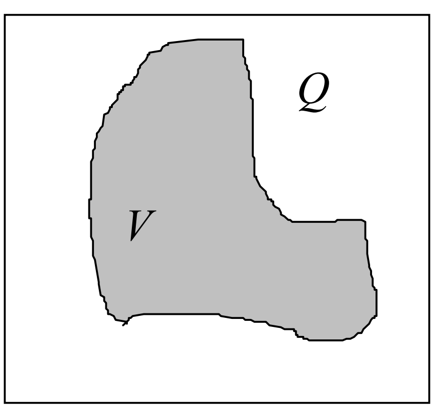
$$\int_V f(\mathbf{X})dV = \overline{f(\mathbf{X})}V.$$

Ідея Монте-Карло полягає в тому, щоб оцінити середнє значення функції $\overline{f(\mathbf{X})}$ на основі випадкової вибірки. Для цього в багатовимірній області V випадковим чином вибирають n точок $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, ..., \mathbf{X}_n$, які з однаковою ймовірністю можуть опинитися в будь-якій частині V. Середнє значення функції $\overline{f(\mathbf{X})}$ оцінюють як середнє вибіркове значення

$$\overline{f(\mathbf{X})} = \frac{\sum_{i=1}^{n} f(\mathbf{X}_i)}{n}.$$

Теорія ймовірностей визначає, що середня квадратична похибка такої оцінки зменшується як $\frac{1}{\sqrt{n}}$.

Якщо область V має складну форму, то виникають складності як з обчисленням об'єму V, так і з рівномірною генерацією випадкових точок. У цьому випадку область V охоплюють областю Q, що має правильну форму (зазвичай багатовимірний куб), а функцію $f(\mathbf{X})$ довизначають у області Q так, щоб $f(\mathbf{X}) = 0$, якщо $\mathbf{X} \notin V$. У цьому випадку



$$\int_Q f(\mathbf{X})dV = \int_V f(\mathbf{X})dV.$$

Тоді

$$\int_V f(\mathbf{X})dV = \frac{\sum_{i=1}^{n} f(\mathbf{X}_i)}{n} Q,$$

де Q — об'єм області Q.

Метод Монте-Карло може бути використаний для одержання оцінки об'єму багатовимірної області V. У цьому випадку слід покласти $f\left(\mathbf{X}\right)=\begin{cases}1, \mathbf{X}\in V\\ 0, \mathbf{X}\notin V\end{cases}$. Тоді $\sum_{i=1}^{n} f\left(\mathbf{X}_i\right)$ визначає кількість попадань у область V, а $\overline{f\left(\mathbf{X}\right)}$ — долю попадань. Отже, об'єм багатовимірної області V може бути оцінено як $V=\overline{f\left(\mathbf{X}\right)}\,Q$.