

4 Численное интегрирование. Метод Монте-Карло.

Все методы вычисления определенных интегралов можно разделить на две большие группы. Методы первой из них заменяют подынтегральную функцию более простой для интегрирования, но близкой к ней. При этом широко используется аддитивность интеграла, т.е. весь промежуток интегрирования разбивают на такие отрезки, на которых интерполяция подынтегральной функции может быть получена достаточно просто без особого ущерба для точности. Методы второй группы тем или иным образом используют геометрический смысл интеграла — они вычисляют площадь под кривой (объем, площадь поверхности и т.д. для более сложных задач). В силу непрерывного характера подынтегральной функции сделать это точно за конечное число операций невозможно, но зато можно сравнительно просто (в смысле простоты алгоритма) получить оценку площади. Для этого используется, как правило, метод случайных испытаний, известный также как метод Монте-Карло.

4.1 Простейшие квадратурные формулы

В этом разделе мы ограничимся тем, что приведем наиболее простые и употребимые формулы для методов первого типа, формулы оценки погрешностей этих методов. Кроме того, покажем пример того, как может быть получена такая оценка, например, для каких-то модификаций методов.

4.1.1 Метод прямоугольников

Идея метода прямоугольника (точнее, методов) заключается в том, что подынтегральная функция заменяется кусочно-постоянной. Так, приближенное значение интеграла

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

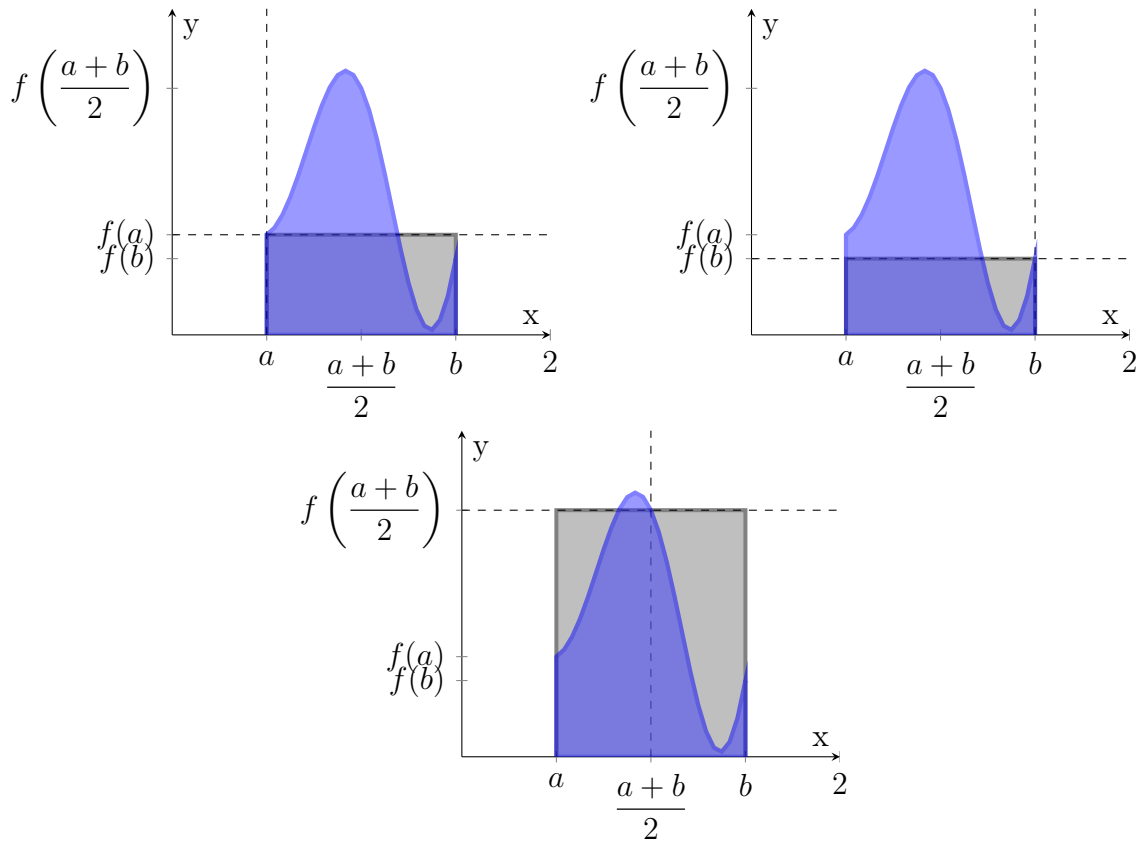
вычисляется по формулам

$$I \approx f(a)(b-a) \quad \text{— формула левых прямоугольников}$$

$$I \approx f(b)(b-a) \quad \text{— формула правых прямоугольников}$$

$$I \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) \quad \text{— формула средних прямоугольников}$$

Смысл этих формул должен быть понятен из следующих рисунков:



Хорошо видно, как велика может быть погрешность такого приближения, если не учитывать характер поведения функции. Чтобы уточнить результат, можно разбить промежуток интегрирования на достаточно малые отрезки так, что на каждом отрезке формула прямоугольников будет хорошо работать. Полученные таким образом формулы интегрирования (иначе говорят еще квадратурные формулы) называются составными. Для формулы прямоугольников они выглядят следующим образом:

$$I \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)(x_{i+1} - x_i) \quad \text{— формула левых прямоугольников}$$

$$I \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1})(x_{i+1} - x_i) \quad \text{— формула правых прямоугольников}$$

$$I \approx \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}\right)(x_{i+1} - x_i) \quad \text{— формула средних прямоугольников}$$

В качестве примера покажем стандартный прием, который позволяет оценить погрешность квадратурной формулы. Пусть требуется оценить погрешность формулы средних прямоугольников. Вычислим разницу между точным и приближенным значением, воспользовавшись при этом разложением подынтегральной функции в ряд Тей-

лора. Для краткости обозначим $\bar{x} = \frac{a+b}{2}$. Имеем:

$$\begin{aligned} E(f) &= \int_a^b f(x)dx - I = \int_a^b \left[f(\bar{x}) + f'(\bar{x})(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}f''(\eta(x))(x - \bar{x})^2 \right] dx - f(\bar{x})(b - a) = \\ &= f(\bar{x})(b - a) + \int_a^b f'(\bar{x})(x - \bar{x})dx + \frac{1}{2} \int_a^b f''(\eta(x))(x - \bar{x})^2 dx - f(\bar{x})(b - a) = \\ &= f'''(\xi) \frac{(b - a)^3}{24}. \end{aligned}$$

Здесь $\xi \in [a, b]$ — произвольная точка, которую мы выбираем по теореме о средней точке. Таким образом, чем меньше промежуток интегрирования, тем выше точность формулы. Разумеется, если вторая производная подынтегральной функции очень велика, то прямоугольник будет плохо приближать форму криволинейной трапеции под кривой. Для формул левых/правых прямоугольников аналогичным образом можно получить оценку погрешностей

$$E(f) = \frac{f'(\xi)}{2}(b - a)^2, \quad \xi \in [a, b].$$

Если сетка разбиения промежутка равномерная, то можно получить простые формулы для оценки погрешности составных формул:

$$\begin{aligned} E(f) &= \frac{f'(\xi)}{2}(b - a)h && \text{— левые/правые прямоугольники),} \\ E(f) &= \frac{f''(\xi)}{24}(b - a)h^2 && \text{— средние прямоугольники).} \end{aligned}$$

4.1.2 Метод трапеций

Более точным способом измерить площадь криволинейной трапеции является замена функции ее кусочно-линейной аппроксимацией. Тогда вместо площади полоски мы будем иметь площадь трапеции и формула принимает вид

$$\begin{aligned} I &= \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a) + E(f), \\ E(f) &= -\frac{f''(\xi)}{12}(b - a)^3. \end{aligned}$$

Для равномерной сетки получаем составную формулу

$$\begin{aligned} I &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}(x_{i+1} - x_i) + E(f) = \\ &= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_n)) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)h + E(f), \\ E(f) &= -\frac{f''(\xi)}{12}(b - a)h^2. \end{aligned}$$

4.1.3 Метод Симпсона

Наиболее часто используемый ранее при ручных расчетах метод Симпсона основан на аппроксимации подынтегральной функции параболой. Это позволяет повысить порядок точности при сравнительно малом числе вычислений.

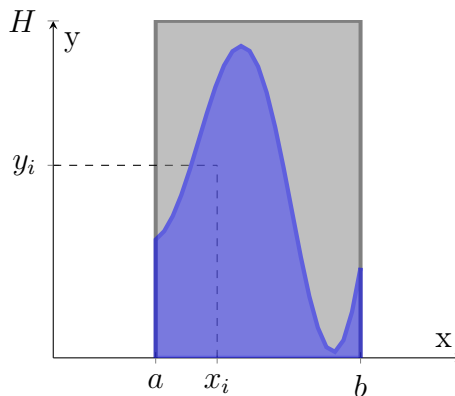
$$I = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) + E(f),$$
$$E(f) = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5.$$

Для получения составной формулы Симпсона удобно отрезок разделить на четное число отрезков. Пусть их будет $2N$. Тогда

$$I = \frac{h}{6} (f_0 + 4(f_1 + f_3 + \dots + f_{2N-1}) + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{2N-2}) + f_{2N}) + E(f),$$
$$E(f) = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)h^4.$$

4.2 Интегрирование методом Монте-Карло

Рассмотрим теперь метод интегрирования, который основан на совершенно иной идее. Пусть мы погрузили график функции, определенный интеграл от которой нам надо найти, в прямоугольник с известной шириной $b-a$ и известной высотой H . Площадь этого прямоугольника равна, как известно, $S = (b-a)H$. Если теперь начать «забрасывать» прямоугольник точками, координаты которых выбираются случайным образом, то, очевидно, вероятность попадания в область под кривой будет пропорциональна площади криволинейной трапеции.



Таким образом, приближенное значение интеграла можно получить по формуле

$$I \approx S \times \frac{\text{количество попаданий под кривую } y = f(x)}{\text{общее число брошенных точек}}.$$

Очевидно, чем больше будет брошено точек, тем точнее будет результат. С другой стороны, слишком много точек использовать тоже не следует, т.к. в этом случае нет никакого выигрыша по сравнению методами предыдущего раздела — они будут требовать меньшего числа операций.

Другая формулировка метода Монте-Карло заключается в том, что случайным образом выбираются точки x_i на оси абсцисс, для которых вычисляется приближенное

значение интеграла по формуле прямоугольников. Затем, после некоторого числа таких случайных испытаний вычисляется среднее значение полученных приближений, т.е.

$$I \approx (b - a) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i).$$

Несмотря на кажущуюся трудозатратность и ненадежность, метод Монте-Карло является практически единственным выходом, когда нужно вычислить определенные интегралы высоких размерностей. Например, чтобы перенести идею замены подынтегральной функции на более простую на случай тройного интеграла, надо провести очень большую работу по выбору этой простой формы, которая учитывала бы к тому же все особенности трехмерной области интегрирования.

Заметим также, что для высоких размерностей второй подход в реализации метода Монте-Карло оказывается более точным и экономным, в то время как для меньших размерностей ситуация обратная.