ЛЕКЦИЯ 12

ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

На прошлой лекции были найдены значения γ, при которых в динамическом методе приближение к положению равновесия максимально.

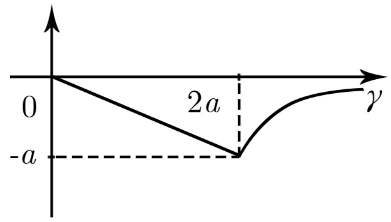

Рис. 12.1

Было показано, что значение γ нужно выбирать из окрестности, где затухание решения наиболее быстрое. Рассмотрим пошаговую реализацию динамического метода. Пусть задано исходное уравнение:

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \nabla\Phi(x) = 0.$$

Запишем уравнение в виде системы:

$$\begin{cases} \dot{x} = v, \\ \dot{v} = -\gamma v - \nabla\Phi(x). \end{cases}$$

Выберем начальное приближение $\vec{x}^{\,(0)}$ и предположим, что $\vec{v}^{\,(0)} = \vec{0}$. Разобьем решение на три шага.

1. Решим второе уравнение системы:

$$\tilde{\vec{v}} = \vec{v}^{\,(k)} - \nabla\Phi(\vec{x}^{\,(k)})\tau.$$

2. $$\vec{v}^{\,(k+1)} = \beta\,\tilde{\vec{v}},$$
   где $\beta < 1$ (чаще всего $\beta = 0{,}995$), τ — временной шаг.
   $$\gamma = 1 - \beta\tau.$$

3. Решим первое уравнение системы:
   $$\vec{x}^{\,(k+1)} = \vec{x}^{\,(k)} + \vec{v}^{\,(k+1)}\tau.$$

Такая схема плоха тем, что в ней присутствуют подгонные параметры τ и β. Значение τ выбирается максимально возможным для устойчивости метода, $\beta = 0{,}995$. Однако в этом методе нет необходимости заботиться о величине минимизируемой функции $\Phi(x)$ и величине ее градиента. При решении сама функция и ее градиент могут возрастать, однако это является преимуществом такого метода.

Во время расчета не рекомендуется:

1. Менять временной шаг τ.

2. Резко менять значение параметра β.

3. Занулять значение скорости.

Если во время решения становится понятно, что колебания идут около положения равновесия, то значение β можно плавно уменьшить до 0,8.

Как и другие методы, динамический метод имеет свои ограничения. Например, если локальный минимум не очень «глубокий», то есть вероятность его пропустить.

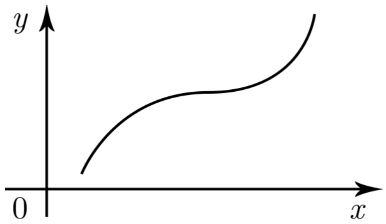

Рис. 12.2

1. Решение СНАУ методом наискорейшего спуска

Пусть задана система нелинейных уравнений

$$\vec{F}(\vec{x}) = 0.$$

Составим функционал, минимум которого будет эквивалентен решению СНАУ.

$$\Phi = (\vec{F}, \vec{F}) = \sum_{i=1}^{n} [f_i(\vec{x})]^2 \to \min .$$

Минимум этого функционала возможен, когда каждая из компонент обращается в ноль, т. е. минимум достигается на решении системы.

Пусть задано предыдущее приближение. Тогда последующее приближение запишем в виде:

$$\vec{x}^{\,(k+1)} = \vec{x}^{\,(k)} - \nabla\Phi(\vec{x}^{\,(k)}) t_k.$$

Введем функцию, зависящую от параметра t_k.

$$w(t) = \Phi(\vec{x}^{\,(k)}) - \nabla\Phi(\vec{x}^{\,(k)}) t_k \equiv \Phi(x^k - \nabla\Phi_k t_k).$$

где $t_k : w'_t(t_k) = 0$.

В общем случае последнее уравнение должно решаться численно. Однако можно найти приближенное значение параметра t_k, при условии, что параметр t_k достаточно мал, и можно пренебречь его квадратом и более высокими степенями.

$$w(t) = \sum_{i=1}^{n} [f_i(x^k - \nabla\Phi_k t)]^2 \approx \sum_{i=1}^{n} [f_i(x^k) - \nabla f_i \nabla\Phi_k t]^2.$$

$$w'(t) \approx 2\sum_{i=1}^{n}[f_i(x^k) - \nabla f_i \nabla \Phi_k t]\nabla f_i \nabla \Phi_k.$$

Тогда условие $w'_t(t_k) = 0$ означает, что

$$t_k = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} f_i(x^k)\nabla f_i(x^k)\nabla \Phi_k}{\sum\limits_{i=1}^{n}[\nabla f_i \nabla \Phi_k]^2},$$

$$t_k = \frac{(\vec{F}, J_k \nabla \Phi_k)}{(J_k \nabla \Phi_k, J_k \nabla \Phi_k)}, \quad J = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}.$$

Тогда для $\nabla \Phi$ получим:

$$\nabla \Phi = \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} = \frac{\partial \sum\limits_{i=1}^{n} f_i^2}{\partial x_j} = 2\sum_{i=1}^{n} f_i \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = 2J^T \vec{F}.$$

Окончательно получим:

$$t_k = \frac{1}{2}\frac{(\vec{F}, JJ^T\vec{F})}{(JJ^T\vec{F}, JJ^T\vec{F})} = \frac{1}{2}\omega.$$

$$\vec{x}^{\,(k+1)} = \vec{x}^{\,(k)} - 2J^T\vec{F}t_k = \vec{x}^{\,(k)} - \omega J^T \vec{F},$$

где

$$\omega = \frac{(\vec{F}, JJ^T\vec{F})}{(JJ^T\vec{F}, JJ^T\vec{F})}.$$

Пример 14

$$\begin{cases} x + x^2 - 2yz = 0{,}1, \\ y - y^2 + 3xz = -0{,}2, \\ z + z^2 + 2xy = 0{,}3. \end{cases}, \quad F = \begin{pmatrix} x + x^2 - 2yz - 0{,}1, \\ y - y^2 + 3xz + 0{,}2, \\ z + z^2 + 2xy - 0{,}3. \end{pmatrix}$$

$$J = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}} = \begin{pmatrix} 1-2x & -2z & -2y \\ 3z & 1-2y & 3x \\ 2y & 2x & 1+2z \end{pmatrix}.$$

В качестве начального приближения выберем:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Тогда получим:

$$J_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E = J_0^T, \quad \omega = \frac{(\vec{F}, EE\vec{F})}{(EE\vec{F}, EE\vec{F})} = 1.$$

Для первой итерации получим:

$$\vec{x}^{\,(1)} = \vec{x}^{\,(0)} - 1 \cdot E\vec{F} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -0{,}1 \\ 0{,}2 \\ -0{,}3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0{,}1 \\ 0{,}2 \\ -0{,}3 \end{pmatrix}.$$

Аналогично для второй итерации:

$$\vec{x}^{\,(2)} = \begin{pmatrix} 0{,}0327 \\ -0{,}2007 \\ 0{,}2453 \end{pmatrix}.$$

2. Численное интегрирование

Рассмотрим два типа задач численного интегрирования:

1. Функция $f(x)$ задана таблично. При этом нет никакой информации о гладкости функции. Также отсутствует свобода выбора узлов сетки.

2. Нахождение интеграла от известной функции. В этом случае требуется вычислить значение функции за наименьшее число итераций. Узлы сетки и веса выбираются так, чтобы получить максимальную точность.

В первом случае используются формулы интерполяционного типа (формулы Ньютона – Котеса). Во втором случае, когда можно управлять выбором узлов и весов функции, используются формулы Гаусса.

3. Формулы Ньютона – Котеса

Пусть заданы некоторое количество точек и значения в них.

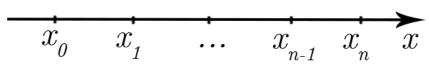

Рис. 12.3

Требуется посчитать интеграл от $a = x_0$ до $b = x_n$.

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx = \sum_i \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx.$$

На каждом отрезке $[x_i; x_{i+1}]$ приблизим значение функции $f(x)$ многочленом нулевой степени.

$$f(x) \approx P_0,$$

где P_0 — одно из значений $\{f(x_i), f(x_{i+1}), f(\xi), f(x_{i+\frac{1}{2}})\}$.

3.1. Формула прямоугольников

Если будем использовать значение $f(\xi)$, то получим **формулу прямоугольников**:

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\underbrace{(x_{i+1}-x_i)}_{h_i} = \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)h_i.$$

Если будем использовать значение $f(x_{i+\frac{1}{2}})$, то получим **формулу прямоугольников с центральной точкой**:

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}})h_i.$$

3.2. Составная формула трапеции

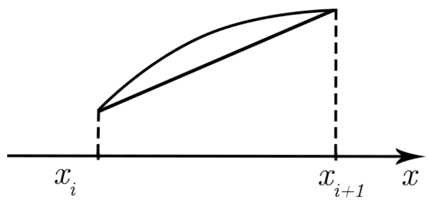

Рис. 12.4

$$f(x) = f(x_i) + \frac{f(x_{j+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) \equiv P_1(x).$$

Тогда получим:

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \approx \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} P_1(x)\,dx.$$

Таким образом, находим площадь трапеции, т. е.

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} = \frac{1}{2}(f(x_i) - f(x_{i-1}))h_i.$$

Окончательно получим:

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{2}(f(x_i) - f(x_{i-1}))h_i.$$

Если сетка равномерная, то вычисления довольно просты.

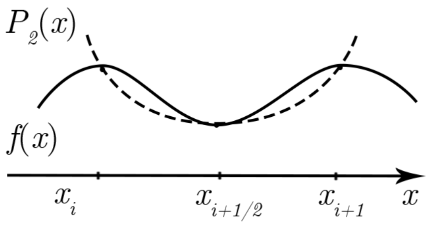

Рис. 12.5

3.3. Формула Симпсона

Формула использует аппроксимацию по трем точкам.

$$f(x) \approx P_2(x).$$

Тогда:

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \approx \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} P_2(x)\,dx,$$

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} P_2(x)\,dx = \frac{h_i}{6}(f(x_i) + 4f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(x_{i+1})),$$

где $h_i = x_{i+1} - x_i$.

Если разбить отрезок на попарно равные интервалы ($x_0x_1 = x_1x_2$, $x_2x_3 = x_3x_4$), то:

$$\int\limits_{a}^{b} f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n/2} \frac{h_i}{3}(f_{2i} + 4f_{2i+1} + f_{2i+2}).$$

Получим **формулу Симпсона без дробных индексов**.

3.4. Формула 3/8

Формула использует аппроксимацию по четырем точкам.

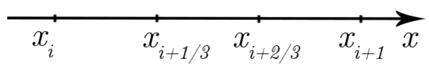

Рис. 12.6

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \approx \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} P_3(x)\,dx = \frac{h_i}{8}(f_i + 3f_{i+\frac{1}{3}} + 3f_{i+\frac{2}{3}} + f_{i+1}).$$

Можно строить формулы Ньютона–Котеса и более высокого порядка, однако, как правило, ограничиваются формулой Симпсона и формулой 3/8. В этих случаях все веса квадратичных формул положительные. Однако, если подынтегральную функцию заменить многочленом степени 6 и выше, то среди весов появятся отрицательные величины. Тогда формулы интегрирования станут неправильными.

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \to \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i),$$

где x_i — узлы квадратичной формулы, α_i — ее веса. Если $f(x) \approx P_n(x), n \leqslant 6$, то $\forall \alpha_{n_i} > 0$. Если $n > 7$, то среди α_{n_i} появляются отрицательные величины.

Очевидно, что

$$\sum_{i=0}^{N} \alpha_{n_i} = b - a.$$

Д. Пойа доказал, что при $N \to \infty$ $\sum\limits_{i=0}^{N} |\alpha_{n_i}| \to \infty$. Это есть следствие того, что при увеличении порядка многочлена сильно растет константа Лебега.

4. Погрешность интегрирования

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{(x-x_0)\ldots(x-x_n)}_{\omega_{n+1}(x)}.$$

Отсюда следует:

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx - \int\limits_a^b P_n(x)\,dx = \int\limits_a^b \sum \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)\ldots(x-x_n),$$

где $(x-x_0)\ldots(x-x_n)$ — разбиение на отрезке $[x_i; x_{i+1}]$, нужное для построения интерполянта.

4.1. Формула прямоугольников

$$\left|\int\limits_a^b f(x)\,dx - \sum_{i=0}^{n-1} h_i f(\xi_i)\right| \leqslant \frac{||f'||}{1!} \sum_{i=0}^{n} \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)\,dx =$$

$$= \frac{||f'||}{1!} \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{4} h^2 = \frac{1}{4}||f'||h(b-a).$$

Т. к. h входит в первой степени, то формула прямоугольников является формулой первого порядка аппроксимации. Однако для формулы прямоугольников с центральной точкой это не так. Для этого метода порядок аппроксимации будет второй.

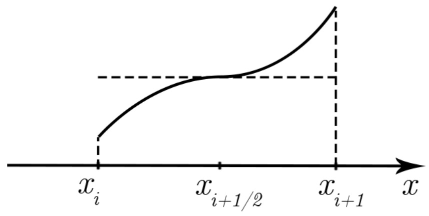

Рис. 12.7

4.2. Формула прямоугольников с центральной точкой

Предположим, что в точке $x_{i+\frac{1}{2}}$ задано не только значение функции, но и значение ее производной.

$$f(x) \approx \underbrace{f(x_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{f'(x_{i+\frac{1}{2}})}{1!}(x - x_{i+\frac{1}{2}})}_{\tilde{P}_1} + \frac{1}{2!}f''(\xi)(x - x_{i+\frac{1}{2}}).$$

P_1 — нечетная функция относительно середины интервала по симметричной области. Значит, интеграл от P_1 равен нулю. В этом случае:

$$\left|\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (f(x) - \tilde{P}_1(x))\,dx\right| \leqslant \frac{||f||}{2!}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_{i+\frac{1}{2}})^2\,d(x - x_{i+\frac{1}{2}}) =$$

$$= \frac{1}{2}||f''|| \cdot \frac{1}{3}(x - x_{i+\frac{1}{2}})^3\Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = \frac{1}{24}||f''||h^3.$$

Окончательно на всем отрезке интегрирования получим:

$$\left|\int\limits_a^b f(x)\,dx - \text{Ф.П.}\right| \leqslant \frac{||f''||}{24}h^2(b-a).$$

Такой метод обладает вторым порядком аппроксимации.

4.3. Погрешность формулы трапеции

$$f(x) \approx P_1(x) + \frac{||f''||}{2!}(x - x_i)(x - x_{i+1}),$$

$$\left|\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (f(x) - \text{Ф.Т.})\right| \leqslant \frac{||f''||}{2}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} |(x - x_i)(x - x_{i+1})|\,dx = \frac{1}{12}||f''||h^3.$$

Тогда на всем отрезке интегрирования получим:

$$\left|\int\limits_a^b f(x)\,dx - \text{Ф.Т.}\right| \leqslant \frac{||f''||}{12}h^2(b-a).$$

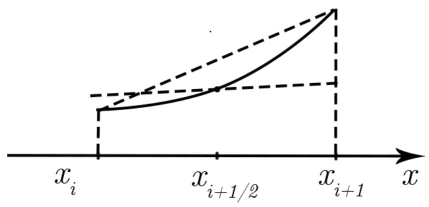

Рис. 12.8

Предположим, что функция выпукла вниз, т. е. $f''(x) > 0$.

Формула трапеции дает значение интеграла с избытком. Формула прямоугольников по средней точке — с недостатком. Можно скомбинировать эти два метода, чтобы избыток одного компенсировал недостаток другого. Такая комбинация дает формулу Симпсона.

4.4. Погрешность формулы Симпсона

Рассмотрим интерполяционный многочлен с кратным средним узлом.

$$f(x) \approx \underbrace{P_2(x) + f(x_i, x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}, x_i)(x - x_i)(x - x_{i+\frac{1}{2}})(x - x_i)}_{\tilde{P}_3},$$

где

$$f(x_i, x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}, x_i) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x_i, x_{i+\frac{1}{2}} + \epsilon, x_{i+1}) - f(x_i, x_{i+\frac{1}{2}} - \epsilon, x_{i+1})}{2\epsilon}.$$

Если функция дважды непрерывно дифференцируема, то такой предел существует и конечен. На отрезке $[x_i; x_{i+1}]$ получим:

$$\left| \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\, dx - \text{Ф.С.} \right| \leqslant \frac{||f^{(4)}||}{4!} \left| \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)(x - x_{i+\frac{1}{2}})^2 (x - x_{i+1})\, dx \right| \leqslant \frac{||f^{(4)}||}{2880} h^5.$$

Интегрирование по добавочному члену по симметричному отрезку дает ноль. Тогда на всем отрезке интегрирования получим:

$$\left| \int\limits_a^b f(x)\, dx - \text{Ф.С.} \right| \leqslant \frac{||f^{(4)}||}{2880} h^4 (b - a).$$