§ 1. Срединная формула прямоугольников

Введем обозначение

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

Пусть f, f', f''-непрерывны на $[a,b]$. Разделим отрезок $[a,b]$ на N равных частичных отрезков $[x_i, x_{i+1}]$, где

$$x_i = x_0 + ih,\ i = 0,1,2...N,\ x_0 = a,\ x_N = b,\ h = \frac{b-a}{N}.$$

Введем обозначения $f_i \equiv f(x_i),\ f_i' \equiv f'(x_i),\ f_i'' \equiv f''(x_i)$. Представим интеграл I в виде

$$I = \sum_{i=0}^{N-1} I_i, \tag{4.1}$$

где

$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx. \tag{4.2}$$

Вычислим приближенно каждый интеграл I_i.

Для этого разложим $f(x)$ по формуле Тейлора до первой производной в окрестности точки $x_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$:

$$f(x) = f_{i+\frac{1}{2}} + f'_{i+1/2}(x - x_{i+1/2}) + f''(\xi_i)\frac{(x - x_{i+1/2})^2}{2!}, \tag{4.3}$$

где $x_i < \xi_i < x$. Подставляя (4.3) в (4.2), получим

$$I_i = hf_{i+1/2} + \frac{h^3}{24} f''(\xi_i). \tag{4.4}$$

Учитывая (4.4) и пренебрегая остаточным членом, из (4.1) находим формулу прямоугольников

$$I \approx h\left[f_{1/2} + f_{3/2} + \ldots. + f_{N-1/2}\right]. \qquad (4.5)$$

Согласно (4.4) погрешность формулы (4.5) определяется неравенством

$$\Delta_1 = \frac{h^3}{24}\sum_{i=0}^{N-1}\left|f''(\xi_i)\right| = \frac{h^2}{24}(b-a)\left|f''(\xi)\right| \le \frac{h^2}{24}(b-a)\max_{[a,b]}\left|f''(x)\right|.$$

§ 2. Формула трапеций

Обозначения прежние. Разложим $f(x)$ по формуле Тейлора до первой производной в окрестности точек x_i, x_{i+1}:

$$f(x) = f_i + f_i'(x - x_i) + f''(\xi_i)\frac{(x - x_i)^2}{2!},$$

$$f(x) = f_{i+1} + f_{i+1}'(x - x_{i+1}) + f''(\xi_{i+1})\frac{(x - x_{i+1})^2}{2!},$$

где $x_i < \xi_i < x,\ \ x < \xi_{i+1} < x_{i+1}$. Тогда с одной стороны

$$I_i = hf_i + \frac{h^2}{2}f_i' + \frac{h^3}{6}f''(\xi_\mathrm{i}), \qquad (4.6)$$

а с другой стороны

$$I_i = hf_{i+1} - \frac{h^2}{2}f_{i+1}' + \frac{h^3}{6}f''(\xi_{i+1}). \qquad (4.7)$$

Используя формулы (4.6) и (4.7) получим

$$I_i = \frac{h}{2}[f_i + f_{i+1}] - \frac{h^2}{4}[f'_{i+1} - f'_i] + \frac{h^3}{12}[f''(\xi_i) + f''(\xi_{i+1})] =$$
$$= \frac{h}{2}[f_i + f_{i+1}] - \frac{h^3}{4} f''(\xi_i) + \frac{h^3}{6} f''(\xi_i) = \frac{h}{2}[f_i + f_{i+1}] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i) \tag{4.8}$$

Окончательно находим формулу трапеций

$$I \approx h\left[\frac{f_0 + f_N}{2} + f_1 + f_2 + ...\right]. \tag{4.9}$$

Согласно (4.8) погрешность формулы (4.9) определяется следующим образом

$$\Delta_2 = \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{N-1} |f''(\xi_i)| = \frac{h^2(b-a)}{12} |f''(\xi)| \le \frac{h^2(b-a)}{12} \max_{[a,b]} |f''(x)|$$

§ 3. Формула Симпсона

Пусть $x_i = x_0 + ih,\ i = 0,1,2,...,2N$,

$$I = \sum_{j=0}^{N-1} I_j,\ I_j = \int_{x_{2j}}^{x_{2j+2}} f(x)dx.$$

Разложим $f(x)$ по формуле Тейлора до 3 производной в окрестности точки x_{2j+1}

$$f(x) = f_{2j+1} + f'_{2j+1}(x - x_{2j+1}) + f''_{2j+1} \frac{(x - x_{2j+1})^2}{2!} + f'''_{2j+1} \frac{(x - x_{2j+1})^3}{3!} +$$
$$+ f^{(4)}(\xi_j) \frac{(x - x_{2j+1})^4}{4!}$$

Тогда

$$I_i = 2hf_{2j+1} + 2\frac{f''_{2j+1}}{6}h^3 + 2\frac{f^{(4)}(\xi_j)}{120}h^5 =$$

$$= \left| f''_{2j+1} = \frac{f_{2j} + f_{2j+2} - 2f_{2j+1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_j) \right| =$$

$$= 2hf_{2j+1} + \frac{h}{3}\left[f_{2j} + f_{2j+2} - 2f_{2j+1}\right] + \left[\frac{f^{(4)}(\xi_j)}{60} - \frac{f^{(4)}(\xi_j)}{36}\right]h^5$$

Окончательно формула Симпсона имеет вид

$$I \approx \frac{h}{3}[f_0 + f_{2N} + 2(f_2 + f_4 + ...) + 4(f_1 + f_3 + ..)].$$

Погрешность формулы Симпсона оценивается неравенством

$$\Delta_3 = \frac{h^5}{90}\sum_{j=0}^{N-1}\left|f^{(4)}(\xi_j)\right| = \frac{h^4(b-a)}{180}\left|f^{(4)}(\xi)\right| \le \frac{h^4(b-a)}{180}\max_{[a,b]}\left|f^{(4)}(x)\right|$$

.

Пример. Вычислить интеграл $\int_1^2 \frac{dx}{x}$ и оценить погрешность. Разделим отрезок $[1,2]$ на $N = 10$ частей. При этом шаг $h = \frac{2-1}{10} = 0.1$. Оценим погрешности:

$$\Delta_1 = \frac{h^2(b-a)}{24}\max_{[1,2]}|f''| = \frac{10^{-2}}{24}1\cdot 2 = \frac{1}{1200} \approx 0.001$$

$$\Delta_2 = 2\Delta_1 = \frac{1}{600} \approx 0.002$$

$$\Delta_3 = \frac{h^4(b-a)}{180}\max_{[1,2]}\left|f^{(4)}\right| = \frac{10^{-4}}{180}\cdot 6\cdot 4 = \frac{1}{75000} \approx 1.3\cdot 10^{-5}$$

Расчетные данные представим в виде таблицы.

Таблица 4

Расчетная таблица

x_i	$f(x)=\dfrac{1}{x}$
1.0	1.00000
1.1	0.90909
1.2	0.83333
1.3	0.76923
1.4	0.71429
1.5	0.66667
1.6	0.62500
1.7	0.58824
1.8	0.55556
1.9	0.52632
2.0	0.50000

Вычислим значение интеграла по формуле трапеций

$$I \approx 0.1\left[\frac{1+0.5}{2}+0.90909+0.83333+...\right]=0.694\pm 0.002$$

По формуле Симпсона интеграл равен

$$I \approx \frac{0.1}{3}\left[1+0.5+2(0.83333+0.71429+..)+4(0.90909+0.76923+..)\right]=$$
$$=0.69315\pm 0.00001$$

§4. Простейший метод Монте-Карло

Пусть требуется вычислить определенный интеграл

$$I \equiv \int_a^b f(x)dx. \tag{4.10}$$

Выберем определенную на отрезке $[a,b]$ произвольную плотность распределения $\varphi_\xi(x)>0$ случайной величины ξ, которая нормирована условием

$$\int_a^b \varphi_\xi(x)dx=1.$$

Введем случайную величину

$$\eta = \frac{f(\xi)}{\varphi_\xi(\xi)}.$$

Вычислим математическое ожидание случайной величины η

$$M(\eta) = \int_a^b \left[\frac{f(x)}{\varphi_\xi(x)} \right] \cdot \varphi_\xi(x) dx = \int_a^b f(x) dx = I . \quad (4.11)$$

Формула (4.11) означает, что можно вычислить интеграл (4.10), вычислив математическое ожидание случайной величины η. Для вычисления $M(\eta)$ воспользуемся методами математической статистики. Выберем N значений $x_1, x_2, \ldots x_N$ случайной величины ξ, тогда по теореме Чебышева при достаточно большом N имеем

$$I = M(\eta) \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{f(x_j)}{\varphi(x_j)}, \quad (4.12)$$

где $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{f(x_j)}{\varphi(x_j)}$ – точечная оценка математического ожидания $M(\eta)$.

На основании правила трех сигм для нормального распределения справедлива следующая формула

$$P\left[\left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{f(x_j)}{\varphi(x_j)} - I \right| < 3 \frac{S(\eta)}{\sqrt{N}} \right] = 0.997 . \quad (4.13)$$

Здесь P - вероятность события $\left[\left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{f(x_j)}{\varphi(x_j)} - I \right| < 3 \frac{S(\eta)}{\sqrt{N}} \right]$, $S^2(\eta)$- смещенная выборочная дисперсия случайной величины η и

$$S^2(\eta) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} y_j^2 - \left[\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} y_j \right]^2, \; y_j = \frac{f(x_j)}{\varphi_\xi(x_j)}. \quad (4.14)$$

Формула (4.13) означает, что с вероятностью близкой к 1, абсолютная погрешность вычисления интеграла (4.10) не превосходит величины $3\frac{S(\eta)}{\sqrt{N}}$, так что погрешность Δ_M метода равна

$$\Delta_M = 3\frac{S(\eta)}{\sqrt{N}}.$$

При реализации метода Монте-Карло обычно в качестве $\varphi_\xi(x)$ используют равномерное распределение

$$\varphi_\xi(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{b-a}, & x \in [a,b] \\ 0, & x \notin [a,b] \end{cases}. \qquad (4.15)$$

Тогда с учетом (4.15) формулы (4.12) и (4.14) примут вид

$$I = \frac{b-a}{N}\sum_{j=1}^{N} f(x_j),$$

$$S^2(\eta) = \frac{(b-a)^2}{N}\sum_{j=1}^{N} f^2(x_j) - I^2,$$

где выборочные значения x_j из равномерно распределенной генеральной совокупности ξ реализуются с помощью системной функции $\mathrm{rnd}(t)$

$$x_j = a + \mathrm{rnd}(b-a),\ j = 1,2,\ldots,N$$

§5. Геометрический метод Монте-Карло

Вычислим однократный интеграл

$$\int_0^1 f(x)dx.$$

Дополнительно потребуем, чтобы для функции $f(x)$ было справедливо неравенство

$$0 \le f(x) \le 1.$$

Для реализации метода генерируется N независимых случайных точек

$$P_j(\xi_j, \eta_j),$$

где ξ_j, η_j – независимые случайные величины равномерно распределенные на отрезке $[0,1]$. Пусть x_j, y_j – выборочные значения этих величин и

$$x_j = a + \mathrm{rnd}(b-a),\ y_j = f(a) + \mathrm{rnd}(f(b) - f(a)).$$

Если для двух случайных величин ξ_j и η_j окажется, что

$$f(x_j) < y_j,$$

то событие считается неблагоприятным. Если же

$$f(x_j) \ge y_j,$$

то событие считается благоприятным, так как в этом случае точка с координатами (x_j, y_j) попадает в область криволинейной трапеции, ограниченной осями координат и кривой подынтегральной функции.

Пусть оказалось, что после реализации N испытаний число благоприятных событий равно ν, которое можно найти с помощью системной единичной функции $\Phi(x) = \begin{cases} 1, & x \ge 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$ компьютерной программы «Mathcad. 2001» по формуле

$$\nu = \sum_j \Phi\left(f(x_j) - y_j\right).$$

По теореме Бернулли, являющейся частным случаем теоремы Чебышева, и свойству плотности вероятности относительная частота благоприятных событий $\frac{\nu}{N}$ приблизительно равна площади криволинейной трапеции, т.е.

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{\nu}{N}, \qquad (4.16)$$

и при $N \to \infty$ справедливо равенство

$$\int_0^1 f(x)dx = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{\nu}{N}\right).$$

Рассмотрим теперь общий случай. Пусть нам необходимо вычислить интеграл

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

где

$$c \le f(x) \le d\ .$$

Введем новую функцию

$$\varphi(x) = \frac{f(x)-c}{d-c},$$

которая изменяется от 0 до 1. Тогда

$$\int_a^b f(x)dx = (d-c)\int_a^b \varphi(x)dx + c(b-a). \qquad (4.17)$$

При вычислении интеграла $\int_a^b \varphi(x)dx$ выполним замену переменной $t = \frac{x-a}{b-a}$, тогда интеграл (4.17) будет равен

$$\int_a^b f(x)dx = (d-c)(b-a)\int_0^1 \varphi((b-a)t+a)dt + c(b-a), \qquad (4.13)$$

где интеграл, стоящий в правой части (4.15) вычисляется с помощью геометрического метода Монте-Карло по формуле (4.16).

Погрешность метода можно определить, воспользовавшись интегральной формулой Муавра-Лапласа

$$P\left[\left|\frac{\nu}{N} - I\right| < \varepsilon\right] = 2\Phi\left(\varepsilon\sqrt{\frac{N}{p(1-p)}}\right) = \gamma, \qquad (4.19)$$

где обычно доверительная вероятность $\gamma = 0.99$, p-вероятность попадания отдельной точки в область криволинейной трапеции, $\sigma = \sqrt{p(1-p)}$, $\sigma_{\max} = \frac{1}{2}$, откуда по таблице функции Лапласа $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^x e^{-\frac{t^2}{2}}dt$ находим $\varepsilon = \frac{2.58}{2\sqrt{N}}$. Формула (4.14) означает, что с вероятностью $\gamma = 0.99$ близкой к единице абсолютная погрешность вычисления интеграла I не превосходит величины $\frac{2.58}{2\sqrt{N}}$, так что погрешность геометрического метода Монте-Карло равна

$$\Delta_M \approx \frac{2.58}{2\sqrt{N}}.$$