Уфа: УГАТУ, 2002

Вестник УГАТУ

Т. 3, № 1. С. 60–64

НАУЧНЫЕ СТАТЬИ И ДОКЛАДЫ • МАТЕМАТИКА

УДК 517.392+518

М. Д. РАМАЗАНОВ

ПРИБЛИЖЕННЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ КРАТНЫХ ИНТЕГРАЛОВ С ГАРАНТИРОВАННЫМИ ОЦЕНКАМИ

Дана постановка задачи о вычислении кратных интегралов с гарантированной точностью. Очерчены границы этого подхода. Установлена теорема о представимости интерполяционных кубатурных формул в стандартном виде, зависящем от значений интегранта в узлах заданной решетки. *Квадратурные, кубатурные формулы; гарантированные оценки функционала погрешности*

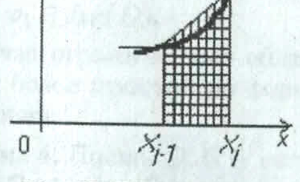
Для приближенного вычисления интегралов функций одной вещественной переменной придумано много формул. Приведем некоторые наиболее известные: формулы прямоугольников, трапеций, формулу Гаусса. В основу их положено определение интеграла как предела интегральных сумм

$$I(f) \equiv \int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\substack{N\to\infty\\ \max_j|\Delta x_j|\to 0}} \sum_{j=1}^N f(\xi_j)\,\Delta x_j,$$

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b,$$

$$\Delta x_j = x_j - x_{j-1}, \xi_j \in [x_{j-1}, x_j], \quad j = 1, N.$$

Для формул прямоугольников и трапеций обычно выбирают деление отрезка интегрирования на равные части, $x_j = a + j\frac{b-a}{N}$, $\Delta x_j = \frac{1}{N}$. В формуле прямоугольников значением аргумента ξ_j берут один из концов отрезков деления $[x_{j-1}, x_j]$ – например, левый, в формуле трапеций – вместо $f(\xi_j)$ ставят среднее арифметическое значений $(f(x_{j-1}) + f(x_j))/2$ на концах отрезков деления.



Очевидно, во втором случае достигается лучшее приближение площадей криволинейных трапеций, возникающих над отрезками $[x_{j-1}, x_j]$. В формуле Гаусса выбором значений Δx_j и аргументов ξ_j добиваются того, чтобы квадратурная формула $K(f) \equiv \sum_{j=1}^N f(\xi_j)\,\Delta x_j$ давала точное значение интеграла для всех многочленов до заданной степени m, минимизируя при этом N – число точек деления и определяемый им объем вычислительной работы. Квадратурные формулы, точно интегрирующие многочлены до некоторой заданной степени, достаточно подробно описаны в книге А. Н. Крылова [1]. Поставленную здесь проблему оценки точности вычисления значений интегралов на целых классах функций поясним двумя результатами, приведенными в [1] со ссылкой на книгу А. А. Маркова «Исчисление конечных разностей. Одесса, 1910». Обозначим погрешность вычисления интеграла

$$\int_a^b f(x)\,dx - \sum_{j=1}^N f(\xi_j)\,\Delta x_j \equiv l_N(f).$$

Для формулы трапеций

$$\left|l_N^{(t)}(f)\right| \leqslant \frac{(b\;a)^3}{12N^2} \max_{a\leqslant x\leqslant b} \left|D^2 f(x)\right|. \quad (1)$$

Для формулы Гаусса (точной на многочленах степени $2N-1$)

$$\left|l_N^{(g)}(f)\right| \leqslant \frac{(b-a)^{2N+1}}{(2N+1)} \times$$

$$\times \frac{(N!)^4}{((2N)!)^3} \max_{a\leqslant x\leqslant b} \left|D^{2N} f(x)\right|. \quad (2)$$

Квадратурные формулы, обладающие оценками точности приближенного значения

Работа поддержана грантами РФФИ (проект № 99-01-00799) и ФЦП «Интеграция» (проекты № 76, № 571).

интеграла, называются формулами с гарантированной, заранее известной, точностью. Следует сказать, что гарантированные оценки точности имеют больше теоретическое значение, потому что оценить производные можно только для функций, заданных аналитически. Для иллюстрации ситуации, существовавшей в докомпьютерное время, сошлемся на приведенную А. Н. Крыловым цитату из книги Laurent «Traté d'analyse»: «Эти формулы доставляют численное $\pm$ значение искомого интеграла с приближением, которое, в общем, зависит от терпения вычислителя». С появлением ЭВМ и компьютеров получение квадратурных формул для задач общего положения (на конечных отрезках) и гладких функций перестало быть задачей теории, так как можно без особого труда, пользуясь стандартными пакетами программ, получать десятки знаков приближенного значения интеграла конкретной функции. Однако без оценки производных интегрируемой функции остается неизвестным, какие цифры вычисленного значения истинны. Приходится брать результат на веру.

Заметим, что в приведенных примерах (и большинстве других) квадратурные формулы являются линейными функционалами на линейном пространстве подынтегральных функций — интегрантов. Это естественное отражение того, что линейными функционалами являются интегральные суммы и сам интеграл — их предельное значение. Можно использовать линейность квадратурных формул в следующей общей схеме получения гарантированных оценок. Пусть формула предназначена для вычисления интегралов от функций, составляющих некоторое банахово пространство B, через которое учитываются гладкости функций (и другие известные их свойства). Так как в квадратурных формулах используются значения интегрантов в заданных точках, накладываем достаточное для возможности этого условие вложения B в пространство непрерывных функций, $B \subset C[a,b]$. Погрешность приближенного вычисления интеграла $l(f) = I(f) - K(f)$ является линейным функционалом на B и имеет гарантированную оценку

$$l_N(f) \leqslant \|l_N\|_{B^*}\|f\|_B, \qquad (3)$$

где $\|l_N\|_{B^*} \equiv \sup\limits_{\|f\|_B=1} |l_N(f)|$ — норма функционала погрешности. При сгущении деления отрезка интегрирования — возрастании N — должна возрастать и точность интегрирования. Значит, следует рассматривать последовательность квадратурных формул $\{K_N(f)\}_{N\to\infty}$.

Отметим, что от N зависит в оценке (3) только первый множитель — норма функционала погрешности. Увеличение точности фиксируется убыванием норм функционалов погрешностей, а для этого накладывается простейшее достаточное условие, обеспечивающее стремление норм к нулю: компактность вложения пространства интегрантов B в пространство непрерывных функций, $B \subset\subset C[a,b]$. Качество формулы приближенного интегрирования естественно измерять скоростью стремления к нулю последовательности норм функционалов погрешностей $\{\|l_N\|_{B^*}\}_{N\to\infty}$. В рамках этой теории оценка (1) функционала погрешности формулы трапеций принимает вид

$$\|l_N^t\|_{(C^2[a,b])^*} \leqslant (b-a)^3/12N^2,$$

а оценка (2) — для формулы Гаусса:

$$\|l_N^g\|_{(C^{2N}[a,b])^*} \leqslant (b-a)^{2N+1} \times \times (N!)^4/(2N+1)((2N)!)^3.$$

Описанный подход был реализован в книге С. М. Никольского [2].

При переходе к приближенному вычислению кратных интегралов возникают новые затруднения.

Во-первых, даже двухмерные области интегрирования разнообразны по форме и, вообще говоря, не могут быть преобразованы гладкими заменами переменных к какой-нибудь канонической форме, например, к квадрату. Если же мы хотим задать двойной интеграл как повторный

$$\iint\limits_{\Omega} f(x_1,x_2)dx_1d_2 = \int\limits_a^b dx_2 \int\limits_{c(x_2)}^{d(x_2)} dx_1 f(x_1,x_2),$$

то должны уметь вычислять переменные пределы интегрирования внутреннего интеграла. В более общем n-мерном случае эта задача необозримо усложняется, потому что мы теряем наглядность представления, если область интегрирования имеет сколько-нибудь сложную форму. Для областей произвольных форм не приходится и говорить об оптимизации расположения узлов и, следовательно, о формулах гауссовского вида.

Во-вторых, с ростом размерности задача быстро усложняется: приближенные вычисления интегралов по мерной области от функций с m производными из пространства C^m

с заданной ε-точностью требуют числа операций порядка числа узлов $N = O(\varepsilon^{-n/m})$, растущего экспоненциально с ростом размерности. Это второе обстоятельство не может быть устранено.

Однако из приложений [1] поступают заказы на вычисления интегралов кратностей порядков нескольких сот. Возьмем для примера кратность 100, точность вычисления $\varepsilon = 0{,}1$ и C^2-пространство интегрантов. Тогда требуемое число операций 10^{50} неисполнимо никакой ЭВМ даже в обозримом будущем. Значит, сейчас невозможно вычисление с гарантированной точностью интегралов большой кратности. Для вычислений таких интегралов в сороковые годы прошлого века (время начала работ над атомными проектами) Джон фон Нейман предложил использовать статистические методы.

Известно, что интеграл $\int_\Omega f(x)\,dx$ можно истолковать как среднее значение подынтегральной функции. Поступим, например, следующим образом. Поместим область Ω в некоторый куб $Q = [a,b]^n$ и доопределим функцию нулем для значений $x \in Q\backslash\Omega$, обозначив продолжение f через f_Ω. Предположим, что аргумент является случайной величиной, равномерно распределенной в кубе Q. Тогда случайная величина $f_\Omega(x)$ имеет математическое ожидание, равное

$$Mf_\Omega = (b-a)^{-n}\int\limits_Q f_\Omega(x)\,dx = (b-a)^{-n}\int\limits_\Omega f(x)\,dx.$$

Mf_Ω можно подсчитать экспериментально, используя датчики случайных (псевдослучайных) чисел.

$$(b-a)^{-n}\int\limits_\Omega f(x)\,dx = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N f_\Omega(x^{(j)}).$$

Погрешность вычисления оценивается дисперсией

$$\sigma_N = M[(b-a)^{-n}\int\limits_\Omega f(x)\,dx - \frac{1}{N}\sum_{j=1}^N f_\Omega(x^{(j)})]^2,$$

для которой известна оценка порядка убывания $\sigma_N = O(\frac{1}{\sqrt{N}})$, скажем, на непрерывно дифференцируемых функциях f. Статистический метод приводит к вероятностной оценке точности вычисления интеграла и, к сожалению, не дает гарантированной оценки погрешности.

Обратим внимание на изложенный в начале статьи функционально-аналитический метод оценки погрешности квадратурных формул. Он может быть автоматически перенесен на многомерный случай. А именно: рассматривается последовательность кубатурных формул

$$K_N(f) = \sum_{j=1}^N c_j f(x^{(j)}),$$

стремящаяся к точному значению интеграла

$$I(f) = \int\limits_\Omega f(x)dx, \quad \overline{\Omega} \subset\subset R^n.$$

Погрешность вычисления измеряется нормой функционала погрешности $l_N(f) = I(f) - K_N(f)$, рассмотренного на некотором банаховом пространстве интегрантов B. Норма пространства B должна учитывать гладкость функций, и, как минимум, пространство B должно быть компактно вложено в $C(\overline{\Omega})$, $B \subset\subset C(\overline{\Omega})$. Тогда для лучших формул последовательность норм их функционалов погрешностей стремится к нулю

$$\|l_N^{\text{opt}}\|_{B^*} = \min_{\{(x^{(j)},c_j)\}}\|l_N\|_{b^*} \equiv \varphi(N),$$

$$\varphi(N) \to 0 \quad \text{при } N \to \infty.$$

Как и в одномерном случае, мы сразу имеем гарантированную оценку погрешности вычисления

$$|l_N(f)| \leqslant \|l_N\|_{B^*}\|f\|_B.$$

Этот подход был реализован С. Л. Соболевым [3, 4]. Для упрощения задачи, сохраняя произвольность форм областей интегрирования, он постулировал решетчатое расположение узлов

$$\{x^{(j)}\}_{j=1}^N = \{hHk\} \quad (k \in Z^n, hHk \in \Omega),$$

где H — матрица $n\times n$ с определителем, равным 1, а h — шаг решетки, являющийся малым параметром задачи:

$$h = (|\Omega|/N)^{1/n}(1 + o(1)).$$

С. Л. Соболевым был указан алгоритм построения формул с асимптотической оценкой норм функционалов погрешностей (на пространстве интегрантов W_2^m)

$$\|l_N^a\|_{(W_2^m)^*} = (\inf_{c_j}\|l_N\|_{(W_2^m)^*})(1 + o(1)).$$

Оценки члена $o(1)$ приводились в работе Ф. Я. Загировой [5]. Надо сказать, что оценки погрешности через норму функционала погрешности оказываются завышенными — еще в книге С. Л. Соболева [3] было доказано, что на любой конкретной функции погрешность вычисления интеграла убывает быстрее. Дело в том, что действие функционала на функцию аналогично их скалярному произведению, а, как мы знаем, скалярное произведение векторов есть не только произведение их норм, но имеет и множитель — «косинус угла между векторами». В наших задачах этот «косинус» тоже стремится к нулю, хотя и не быстро.

Резюмируя, можно сказать, что этот функционально-аналитический подход дает возможность получить асимптотически оптимальные формулы с гарантированными оценками погрешности для вычисления интегралов по областям произвольных форм небольших размерностей, $n \leqslant 10$.

Но и в этом случае много задач, нуждающихся в таких формулах.

В настоящее время в продолжение исследований С. Л. Соболева найдены алгоритмы построения решетчатых кубатурных формул, универсально асимптотически оптимальных на обычно употребительных банаховых пространствах интегрантов: W_p^m, W^μ, C^α. Согласно этим алгоритмам составлены пробные программы вычисления интегралов по двухмерным ограниченным областям произвольных форм. Для проблемы гарантированной оценки погрешности получены значения главного члена асимптотики (при $N \to \infty$) норм функционалов погрешностей этих формул [6, 7].

Опишем другое направление исследований в функционально-аналитическом подходе к задаче приближенного интегрирования. Оно намечено в работе В. Н. Белых [8]. Пусть $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^{\infty}$ — такой базисный набор в пространстве B, конечный отрезок которого для $j = \overline{1,N}$ точно интегрируется кубатурной формулой $K_N(f)$ заданной последовательности $\{K_N\}_{N=1}^{\infty}$. Для функционала погрешности можем выписать оценку

$$|l_N(f) = |l_N(f - \sum_{j=1}^{N} a_j\varphi_j)| \leqslant \leqslant \|l_N\|_{C^*}\|f - \sum_{j=1}^{N} a_j\varphi_j\|_{C}.$$

Легко показать, что $\|l_N\|_{C^*} = |\Omega| + \sum_{j=1}^{N}|c_j|$. Можно показать, что это число равномерно по N ограничено, но, во всяком случае, оно не стремится к нулю. Оценка стремления к нулю погрешности кубатурной формулы получается благодаря второму множителю. Используемый при определении нормы $\|l_N\|_{B^*}$ единичный шар в B является компактом в C и хорошо приближается, если множество $\{\varphi_j\}_{j=1}^{N}$ составляет соответствующую ε_N-сеть этого компакта. В работе Н. А. Стрелкова [9] исследована последовательность $\{\varphi_j\}$ специального вида, приводящая к наилучшему возможному приближению $f \in B$ последовательностями интерполяционных формул $\{\sum_{j=1}^{N} a_j\varphi_j\}_{N\to\infty}$. Оказывается, для заданной решетки $\{H(N)k\}_{k\in Z^n}$ с матрицей $H(N)$, обеспечивающей сгущение узлов при $N \to \infty$, $\det H(N) \neq 0$, и если λ_s — собственные значения матрицы $H(N)$, то $\max_s |\lambda_s(H(N))| \to 0$ при $N \to \infty$, можно подобрать одну функцию $\varphi(x|H)$ с финитным преобразованием Фурье (такая функция в современной литературе называется "wavelet" — «всплеск») так, что множество $\{\varphi_j\}$ получается как $\{\varphi(x - Hk|H)\}_{k\in Z^n}$ и дает наилучшую аппроксимацию в C компакта $\{f \,|\, \|f\|_B \leqslant 1\}$.

Н. А. Стрелковым это обосновано для пространств Л. Хермандера H_p^μ. Наилучшая интерполяция приводит к наилучшей по порядку аппроксимации последовательности решетчатых интерполяционных кубатурных формул. Такая кубатурная формула вида $K_N(f) = |\det H| \sum_{\beta\in Z^n} c_\beta f(H\beta)$ должна, как мы видели, удовлетворять условию

$$\int_\Omega \varphi(x - H\alpha)dx = = |\det H| \sum_{\beta\in Z^n} c_\beta \varphi(H(\beta - \alpha)), \quad \forall\alpha \in Z^n. \quad (4)$$

Вычислим $\{c_\beta\}$, удовлетворяющие этой системе уравнений.

Теорема. *Пусть преобразование Фурье функции φ, $\tilde\varphi(\xi) = \int \varphi(x)e^{2\pi i x\xi}\,dx$ имеет компактный носитель, $\operatorname{supp}\tilde\varphi \equiv \omega \subset\subset R^n$, лежащий в параллелепипеде $H^{-1*}Q$, где H^{-1*} — транспонирование матрицы H^{-1}, а Q — единичный куб, $Q = \{\xi |\ \xi_j \in [0,1),\ j = \overline{1,n}\}$. Тогда*

$$c_\beta = \int_\omega d\xi \int_\Omega dx\, e^{2\pi i\xi(x - H\beta)} + \int_{H^{-1*}Q\setminus\omega} d\xi\, z(\xi) e^{-2\pi i\xi H\beta}, \quad (5)$$

где $z(\xi)$ — произвольная функция.

Доказательство

$$0 = \int\limits_{\Omega} dx \int\limits_{\omega} \tilde{\varphi}(\xi)\, e^{2\pi i \xi (x - H\alpha)} -$$

$$- |\det H| \sum_{\beta} c_\beta \int\limits_{\omega} d\xi\, \tilde{\varphi}(\xi)\, e^{2\pi i \xi H(\beta - \alpha)} =$$

$$= \int\limits_{\omega} d\xi\, \tilde{\varphi}(\xi)\, e^{-2\pi i \xi H\alpha} \times$$

$$\times \left[\int\limits_{\Omega} dx\, e^{2\pi i \xi x} - |\det H| \sum_{\beta} c_\beta e^{2\pi i \xi H\beta} \right] =$$

$$= |\det H|^{-1} \int\limits_{H^*\omega} d\eta\, \tilde{\varphi}(H^{-1*}\eta)\, e^{-2\pi i \eta\alpha} \times$$

$$\times \left[\int\limits_{\Omega} dx\, e^{2\pi i H^{-1*}\eta x} - |\det H| \sum_{\beta} c_\beta e^{2\pi i \eta\beta} \right]$$

при всех $\alpha \in Z^n$. Для этого необходимо и достаточно тождественное обращение в нуль подынтегральной функции, являющейся периодической с основным периодом Q:

$$\phi(\eta) \equiv \tilde{\varphi}(H^{-1*}\eta)\, e^{-2\pi i \eta\alpha} \times$$

$$\times \left[\int\limits_{\Omega} dx e^{2\pi i H^{-1*}\eta x} - |\det H| \sum_{\beta} c_\beta e^{2\pi i \eta\beta} \right]$$

при $\eta \in Q$. Это дает

$$\sum_{\beta} c_\beta e^{2\pi i \eta\beta} = |\det H^{-1}| \times$$

$$\times \begin{cases} \int\limits_{\Omega} dx\, e^{2\pi i \eta H^{-1} x} & \text{для } \eta \in H^*\omega \subset Q, \\ y(\eta) - \text{произвольная функция} \\ \qquad \text{для } \eta \in Q \backslash H^*\omega. \end{cases}$$

Последнее есть равенство для ряда Фурье. Поэтому его коэффициенты находятся по обычным формулам (ниже χ_σ обозначает характеристическую функцию множества σ)

$$c_\beta = |\det H^{-1}| \int\limits_{Q} d\eta\, e^{-2\pi i \eta\beta} \times$$

$$\times \left[\chi_{H^*\omega}(\eta) \int\limits_{\Omega} dx\, e^{2\pi i \eta H^{-1} x} + \chi_{Q\backslash H^*\omega}(\eta) y(\eta) \right] =$$

$$= \int\limits_{H^{-1*}Q} d\xi\, e^{-2\pi i \xi H\beta} \times$$

$$\times \left[\chi_\omega(\xi) \int\limits_{\Omega} dx\, e^{2\pi i \xi x} + (1 - \chi_\omega(\xi)) z(\xi) \right],$$

где $-z(\xi) = y(H^*\xi)$ — произвольная функция. Теорема доказана.

Мы надеемся получить описанным путем новые алгоритмы для программ приближенного вычисления интегралов по многомерным областям с кусочно-гладкими границами, обосновать оптимальные свойства этих формул и дать гарантированные оценки погрешностей вычислений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Крылов А. Н.** Лекции о приближенных вычислениях. М.: ГИТТЛ, 1954. 398 с.
2. **Никольский С. М.** Квадратурные формулы. М.: Наука, 1979. 254 с.
3. **Соболев С. Л.** Введение в теорию кубатурных формул. М.: Наука, 1974. 808 с.
4. **Соболев С. Л., Васкевич В. Л.** Кубатурные формулы. Новосибирск: ИМ СОРАН, 1996. 484 с.
5. **Загирова Ф. Х.** Оценка остаточного члена кубатурных формул с регулярным пограничным слоем // СМЖ. 1974. Т. 15, № 6. С. 1262–1275.
6. **Рамазанов М. Д.** Лекции по теории приближенного интегрирования. Уфа: БГУ, 1973. 176 с.
7. **Ramazanov M. D.** To the theory of Sobolev formulas // Siberian Advances in Mathematics. 1999. V. 9, No 1. P. 99–125.
8. **Белых В. Н.** Ненасыщаемые квадратурные формулы на отрезке // Оптимизация численных методов. Уфа: ИМВЦ УНЦ РАН, 2000. С. 12–40.
9. **Стрелков Н. А.** Проекционно-сеточные поперечники и решетчатые укладки // Мат. сб. 1991. Т. 182, № 10. С. 1513–1532.

ОБ АВТОРЕ

Рамазанов Марат Давидович, профессор, гл. науч. сотр. Ин-та математики с ВЦ УНЦ РАН, профессор кафедры высокопроизводительных вычислительных технологий и систем УГАТУ. Дипл. математик (МГУ, 1962). Д-р физ.-мат. наук по вычисл. математике (ИМ СО АН СССР, 1977). Исследования в области дифференциальных уравнений, функционального анализа, вычислительной математики.