Aplikace matematiky

Jozef Miklośko

Замечания об оптимализации одномерных численных квадратур при аналитически заданной подинтегральной функции

Aplikace matematiky, Vol. 10 (1965), No. 3, 283–288

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/102964

ЗАМЕЧАНИЯ ОБ ОПТИМАЛИЗАЦИИ ОДНОМЕРНЫХ ЧИСЛЕННЫХ КВАДРАТУР ПРИ АНАЛИТИЧЕСКИ ЗАДАННОЙ ПОДИНТЕГРАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ

ЙОЗЕФ МИКЛОШКО (JOZEF MIKLOŠKO)

(к теме а)

С точки зрения оптимализации выбора метода квадратуры для различных подинтегральных функций мы изучали 8 методов, которые имеют общую форму

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \cong M \sum_{i=j}^{n} A_i f(x_i) + R[f]\,.$$

В дальнейшем $f(x)$ значит подинтегральную функцию в аналитической форме, $\langle a, b\rangle$ – интервал интегрирования и n – число точек, в которых вычисляется $f(x)$. Изменяя M, A_i, x_i, j, $R[f]$, мы получим разные методы, из которых мы изучали следующие [1], [2], [3], [4]: Чебышева, Ромберга, Симпсона, Гаусса, Ньютона-Котеса, Уэддла, трапеций и Монте Карло. Изучение было направлено на исследование точности, возможности уточнения результатов, быстроты вычисления и сходимости, численной устойчивости и возможности контроля. Предпологая, что $f(x)$ непрерывна и не имеет много нулей и экстремумов

Таблица 1

Интеграл	Метод	$n \backslash d$	1	2	3	4	5	6	10	20
$\int_{-2}^{-1} \frac{\mathrm{d}x}{(5x+11)^3} = 0{,}0972222222$	Трапеций	1	1	1	1	1	1	1	3	4
	Симпсона	2	1	1	1	1	3	3	4	5
	Уэддла	6	1	4	4	5	6	6	7	9
	Ньютона-Котеса	8	3	4	5	6	6	7	8	9
	Гаусса	8	5	7	8	9	9	10	—	—
	Чебышева	9	3	4	5	6	7	7	9	10
	Ромберга	129	10	—	—	—	—	—	—	—

Постоянные в таблице обозначают число точных цифр.

в $\langle a, b\rangle$, обладает непрерывными производными достаточного порядка — можно путем разбиения $\langle a, b\rangle$ на d подинтервалов всегда вычислить значение интеграла разными методами с произвольной точностью (Табл. 1). Вопрос оптимального выбора одного из них является и так очень важным (Табл. 2). Различия

Таблица 2

Интеграл	Метод	Гаусса	Чебышева	Ромберга	Уэддла	Ньютона-Котеса	Симпсона	Трапеций	Монте Карло
$\int_0^2 \frac{dx}{\sqrt{x+1}(x+2)} = 0{,}523598775$	1.	9	9	9	9	9	9	5	3
	2.	8	21	33	37	65	129	513	2000
	3.	4″	10″	18″	20″	32″	58″	4·02″	16′45″
$\int_1^{100} \frac{dx}{x} = 4{,}60517018$	1.	9	8	8	8	8	8	5	3
	2.	440	900	2049	1201	1981	4097	8193	10 000
	3.	46″	1·20″	3·34″	2·06″	3·21″	7·38″	14·40″	17·02″

1. число точных знаков
2. число необходимо вычисленных $f(x)$
3. машинное время

между методами очень наглядны в случае, когда $f(x)$ дана в сложной форме со многими параметрами в большом $\langle a, b\rangle$. В общем случае имеют на выбор влияние эти критерии: форма и задание $f(x)$, число нулей $f(x)$ и $f'(x)$ в $\langle a, b\rangle$, границы интегрирования, число точек непрерывности, форма производных и разностей в $\langle a, b\rangle$ и форма остатка. Существуют многие методы, которые оптимальны к данным весовым функциям. Выбор в этих случаях является лёгким.

Выбор удобного n является тоже очень важным. После начального, приблизительного выбора n мы можем дальнейший выбор уступить машине с постоянным или автоматическим изменением n. При согласии двух следующих за собой результатов на требуемых цифрах вычисление остановится тестом. При интерполяционных методах часто при этом используется метод половинного шага. При этом все значения $f(x_i)$, которые нужно вычислить при шаге h, применяем при вычислении с шагом $h/2$. Это нельзя сделать у методов наивысшей алгебраической степени точности. Я изложу теперь наш опыт с этими методами.

Метод Ромберга является при непрерывности $f(x)$ в $\langle a, b\rangle$ очень надёжным. Недостатком классической формы Ромберга (шаг $h_k = (b - a)/2^k$; $k = 0, 1, 2, \ldots$) является то, что для достаточной точности нам нужно вычислить $f(x)$ во многих точках x_i, что удлиняет мащинное время. Поэтому теперь начинает употребляеться для вычисления Т-схемы алгорифм (шаг $h_k = (b-a)/(k+1)$; $k = 0, 1, 2, \ldots$), в котором коренным образом уменьшается число вычисляемых $f(x_i)$ [4]. В классической форме при $k \geqq 15$ обыкновенно произойдет переполнение или же вычисление перестанет быть эффективным. Это мы ликвидируем трансформацией $\langle a, b\rangle$ в $\langle 0, 1\rangle$ или разбиением $\langle a, b\rangle$ на d подинтервалов, в которых употребим метод для меньшего k. При больших k тоже возникают ошибки округления и вычисление перестанет быть устойчивым (Табл. 3). Трудно наперед задать k для достаточной точности.

Таблица 3

Интеграл		m	n	Значение I
$I = \int_1^{100} \frac{dx}{x} = 4{,}60517018$	T_m^o	0	2	49,995
		1	3	17,9719306
		2	5	9,87315051
		.	.	.
		.	.	.
		.	.	.
		9	513	4,60517368
		10	1025	4,60517020
		11	2049	4,60517015
		12	4097	4,60517011
		13	8193	4,60517005

Выгодно после каждого вычисления интеграла с новым k вычислить целую Т-схему и соседние результаты тестовать на точность. При минимальном множестве вычисленных $f(x)$ является метод Гаусса самым точным и самым быстрым в большинстве случаев. Метод употребляется в большинстве научно-технических вычислений, оссобенно когда $f(x)$ зависит от многих параметров. При этих группах подобных интегралов тестовыми примерами мы найдем подходящее n, которое мы употребим в других случаях. Напр., при вычислении

$$I = \int_{a_i}^{20} \frac{dx}{1 - \frac{[k_i(1+b_i)\, z_i x^{1/2}]^{4/3}}{x^{13/3}}}$$

при многих параметрах a_i, b_i, k_i, z_i мы получили методом Гаусса при $n = 8$, $d = 4$ требуемую точность. Метод Чебышева имеет наименьшее количество операцией. Ошибки округления возникают тем, что узлами метода являются иррациональные числа (то же положение у Гаусса). Невыгодно, что метод не применим для $n = 8$ и $n \geqq 10$. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса при $n = 8$ и $n \geqq 10$ имеют среди постоянных A_i большие числа, поэтому маленькие ошибки в $f(x_i)$ приводят к большим ошибкам в квадратурной сумме. Формулы выгодно употреблять при меньшем n во многих подинтервалах $\langle a, b\rangle$. Наилучшими оказываются метод Уэддла, Симпсона и трапеций. Метод Уэддла не имеет главного недостатка формул Ньютона-Котеса (о котором мы выше говорили) потому что коэффициенты Котеса при $n = 6$ $\left(A_i \leqq 272; \sum_{i=0}^{6} A_i = 840\right)$ обработкой уменьшаются $\left(A_i \leqq 6; \sum_{i=0}^{6} A_i = 20\right)$. При постоянном шаге является этот метод самым лучшим. Методом половинного шага каждым раздвоением погрешность метода Симпсона уменьшается приблизительно 16 раз. Практически это значит, что каждое следующее вычисление точнее предшествующего на один десятичный знак. Это можно хорошо употребить при выборе нового шага. Метод трапеций употребляется при вычислении Т-схемы Ромберга, при вычислении периодических интегралов, является лучшим для вычисления эллиптических интегралов 1-ого и 2-ого рода (для максимальной точности надо методом трапеций вычислить n значений $f(x)$, методом Гаусса $1\frac{1}{2}n$, Уэддла $3n$, Ромберга $4n$, и т.д.). Метод Монте Карло зависит от числа опытов и от подходящей программы для вычисления случайных чисел. При $n = 3000-10\,000$ точность была $2-3$ десятычных знака. Это положение не изменяется с повышением кратности интеграла. Напр., при 8-кратном интеграле это является уже приемлемым (5000 опытов, машинное время 1 час).

Результаты описанных здесь методов мы можем уточнить: 1. повышением n и d, 2. экстраполяцией по Рихардсону, 3. разностной коррекцией, 4. итерациями. Для интерполяционной квадратуры самая лучшая экстраполяция по Рихардсону [1].

Длина машинного времени зависит от числа узлов, в которых нам нужно вычислить $f(x)$. Метод, по которому получается максимальная точность при минимальном времени, считается самым лучшим. Это и обыкновенно есть метод Гаусса. По методу Ромберга нужно вычислить для той же точности в $3-5$ раз больше значений $f(x)$, по методу Чебышева в $3-6$ раз, по методу Уэддла в $5-7$ раз, по методу Нютона-Котеса в $6-8$ раз, по методу Симпсона в $8-10$ раз.

Быстроту сходимости изучает Табл. 4. Графическим изображением арифметических средних функций $q(n) = t$ (t – точность дана разностью точного и вычисленного значения), аппроксимацией возникнувших ломаных и вычислением их угловых коэффициентов S мы получим приближенные значения для сравнивания быстроты сходимости.

Таблица 4

Метод	Монте Карло	Трапеций	Симпсона	Чебышева	Ньютона-Котеса	Ромберга	Уэддла	Гаусса
S	0,087	0,344	0,577	0,711	0,815	0,854	0,884	1,664

Контроль вычисления интеграла можно провести:

1. Вычислением интеграла разными методами, 2. вычислением интеграла одним методом, но с другим n. Напр., $I = \int_{1,05}^{\alpha-0,2} f(x, \alpha)\, \mathrm{d}x + \int_{\alpha+0,2}^{100} f(x, \alpha)\, \mathrm{d}x$, где

$$f(x, \alpha) = \frac{\ln \dfrac{\alpha - 1 + x}{\alpha}}{\sqrt{x(x-1)}\,(x + 0{,}3)\,(x - \alpha - 0{,}1)};$$

для 15 параметров α были эти интеграли вычислены методом Симпсона с контролем методом Уэддла. Согласие было в 3–4 десятичных знаках – этого было достаточно. При вычислении интеграла

$$I = \int_0^{a_i} 4x(9 - y^2)\, \frac{1 + 2x^2y^2}{(1 + 4x^2y^2)^2}\, \mathrm{d}x,$$

где $y^2/2 + x^2(9 - y^2) - 9 \ln b_i y = 0$, $- a_i$, b_i параметры, мы использовали метод Гаусса для $n = 3, 5, 8$. При $n = 5$ и $n = 8$ было согласие в 9 десятичных знаках.

Табл. 5 оценивает методы с разных точек зрения. Многие вычисления (на ЕЦМ ЗРА-1) это подтвердили.

Таблица 5

Метод	Емкость памяти		Точность		Быстрота	
	1.	2.	3.	4.	5.	6.
Ромберга	85	13	3	2	3	3
Гаусса	40	20	1	1	1	1
Чебышева	42	16	2	3	2	5
Симпсона	43	7	6	6	6	6
Ньютона-Котеса	39	16	5	5	5	4
Трапеций	30	3	7	7	7	7
Уэддла	39	9	4	4	4	2
Монте Карло	68	5	8	8	8	8

1. число инструкций
2. число постоянных

Порядок методов:

3. при данной точности с точки зрения необходимого n
4. при данном n
5. при данной точности
6. с точки зрения сходимости

Литература

[1] *Демидович Б. П., Марон И. А.:* Основы вычислительной математики 1, Москва 1963.
[2] *E. Stiefel:* Altes und neues über numerische Quadratur, ZAAM, Band 41, Heft 10/11, 1961.
[3] *H. Rutishauser:* Ausdehnung des Rombergsehen Princips, Numerische Matematik, Band 5, Heft 1, 1963.
[4] *R. Bulirsh:* Bemerkungen zur Romberg-Integration, Numerische Matematik, Band 6, Heft 1, 1964.

Jozef Mikloško, Ústav mechaniky a automatizácie SAV, Dúbravská cesta, Bratislava-Patrónka, ČSSR.