EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. XVI KOIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1967, NR. 4

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ XVI
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1967, № 4

Р. ПУКК

О НЕКОТОРЫХ ИДЕЯХ УСКОРЕНИЯ ПРОЦЕССА ИНТЕГРИРОВАНИЯ

1. Постановка вопроса

При численном интегрировании функций с заданной относительной (или абсолютной) точностью с помощью ЭЦВМ время работы программы почти целиком зависит от числа обращений программы интегрирования к блоку вычисления функции. Для кратных интегралов это обстоятельство играет еще более важную роль. Поэтому в последнее время ряд работ посвящен разработке алгоритмов, позволяющих достигнуть заданной точности ценой возможно меньшего числа обращений к подынтегральной функции.

В заметке [4] было выяснено, что если даже ограничиться классом гауссовых квадратур или классами гауссовых и уточняющих квадратур [2], потенциальные резервы экономии очень велики.

Мы поставили себе целью создать стандартную программу однократного интегрирования, т. е. программу, вычисляющую интеграл

$$\int_A^B F(x)\,dx \tag{1.1}$$

с заданной точностью ε и использующую при этом возможно меньшее число обращений к подынтегральной функции.

В качестве допустимых квадратур, используемых при интегрировании, были взяты гауссова квадратура n-го порядка G_n, парная ей уточняющая квадратура K_n [2, 3] и дополнительная квадратура S_n, парная квадратуре K_n.

Дополнительную квадратуру S_n, парную квадратуре K_n, было бы разумно определить из задачи, аналогичной задаче построения уточняющей квадратуры K_n, парной квадратуре G_n [2]. Однако такие задачи не разрешимы [8]. Квадратура S_n определяется следующим образом:

обозначим узлы S_n на [01] через y_{Sr} $(r=1,2,\ldots,4n+3)$ и полагаем

$$y_{Sr}=\begin{cases} t_l & \text{при } r=2l \\ t_l+\dfrac{y_{K,2l+1}-y_{K,2l}}{y_{K,2l+2}-y_{K,2l}}\,(t_{l+1}-t_l) & \text{при } r=2l+1, \end{cases}$$

где $l=0,1,\ldots,2_{n+1}$, $t_l(1,2,\ldots,2n+1)$ — узлы K_n, $y_{K,r}$ — узлы K_{2n+1}, $t_0=y_{K,0}=0$, $t_{2n+2}=y_{K,4n+4}=1$.

Веса S_n были определены из условия, чтобы алгебраическая точность S_n равнялась $4n+2$.

2. Оценка достигнутой точности с помощью сравнения результатов применения двух квадратур

В вычислительной практике результат применения некоторой квадратуры обычно контролируют так: применяют к той же функции другую квадратуру и верят, что если обе квадратуры дали близкий результат, то истинное значение интеграла тоже близко к этой величине. Фактически разность двух квадратур, хотя бы и заданных не в одних и тех же узлах, есть квадратура, заданная на совокупности всех узлов обеих квадратур, причем квадратура-разность дает нуль для многочленов, которые обеими исходными квадратурами интегрировались точно.

Пусть R — квадратура с n узлами и с алгебраической точностью $\geqslant n-1$ [5] и T — некоторая другая квадратура с теми же узлами, но имеющая алгебраическую точность $n-2$.

Пусть квадратура $L=R-T$ в том смысле, что веса L равны разности соответствующих весов R и T, а узлы остались прежними. Такая квадратура, примененная к многочленам степени до $n-2$ включительно, дает нуль. Легко доказать, что любая квадратура с теми же узлами, обращающая в нуль многочлены до степени $n-2$ включительно, совпадает с квадратурой L с точностью до множителя. При заданных n узлах закрепим название «онуляющая квадратура» за той из них, у которой сумма модулей весов есть 1.

Из сказанного видно, что сравнение результатов по двум квадратурам эквивалентно оценке ошибки по величине модуля результата применения к той же функции некоторой онуляющей квадратуры.

Обозначим онуляющие квадратуры для квадратур G_n, K_n, S_n соответственно через LG_n, LK_n, LS_n.

3. Оценка квадратуры R на $[ab]\leqslant[AB]$

Пусть ε — заданная относительная точность, которую мы должны достичь при интегрировании $F(x)$ на $[AB]$. Обозначим через $R(ab)$ ($LR(ab)$) результат применения квадратуры R (соответственно LR) к $F(x)$ на $[ab]\leqslant[AB]$.

Будем считать, что квадратура R* дает на $[ab]\leqslant[AB]$ удовлетворительный результат, если

$$k_R\,|LR(ab)|<Э_R, \tag{3.1}$$

где $Э_R=\max\left\{\varepsilon\,|R(ab)|;\ \ \varepsilon\frac{b-a}{B-A};\ \ \mu\varepsilon\,|K_n(AB)|\right\}$**.

Коэффициент k_R определяется соотношением

$$k_R=\left|\frac{\int\limits_a^b F(x)\,dx-R(ab)}{LR(ab)}\right|. \tag{3.2}$$

* R принимает значения G_n, K_n, S_n; LR соответственно LG_n, LK_n, LS_n.
** μ принимает в наших расчетах значение 0,01.

Если в определении $k_G(k_K)$ за $\int_a^b F(x)dx$ брать $K_n(ab)$ (соответственно $S_n(ab)$), то

$$k_G = \left| \frac{K_n(ab) - G_n(ab)}{LG_n(ab)} \right| \approx \left| \frac{LK_n(ab)}{LG_n(ab)} \right|, \quad k_K = \left| \frac{S_n(ab) - K_n(ab)}{LK_n(ab)} \right|. \tag{3.3}$$

Мы положим, что $k_K \leqslant k_G$, $k_S \leqslant k_K$.

Строго говоря, это неверно. Однако некоторым оправданием может служить такое рассуждение: пусть $F(x)$ — «сильно аналитическая» функция, т. е. коэффициенты ее ряда не слишком сильно растут. Квадратуры G_n, K_n, S_n дают ошибки в членах $2n$-й, $3n+2$-й (либо $3n+3$-й), $4n+4$-й степени соответственно. Ошибки у LG_n, LK_n, LS_n возникают, начиная с членов $n-1$-й, $2n$-й, $4n+2$-й степени. Для k_G имеем величину (3.3) $n+1$ порядка малости, для k_K — (3.3) $n+1$ (либо $n+2$) порядка малости. Что касается k_S, то здесь такая оценка не проходит. Однако степени x^m $(m = 4n+5, \ldots, 5n+6)$ интегрируются квадратурой S_n с относительной ошибкой меньшей 10^{-9}. Отсюда при $\varepsilon > 10^{-9}$ можно надеяться, что $k_S \leqslant k_K$ с неменьшим основанием, чем для k_K.

Следовательно, в условии точности (3.1) по квадратурам K_n и S_n можно заменить до сих пор нам неизвестные k_K и k_S через k_G и k_K. Неизвестным остается k_G, ведь нужен он до перехода к квадратурам K, LK. Коэффициент k_G определяется на $[ab]$

$$k_G = \left| \frac{LK_n(\alpha\beta)}{LG_n(\alpha\beta)} \right|, \tag{3.4}$$

где отрезок $[\alpha\beta]$ является наименьшим, содержащим $[ab]$, и на $[\alpha\beta]$ известно соотношение (3.4).

4. Прогноз величин $LK_n(ab)$ и $LS_n(ab)$

Пусть известны результаты применения квадратур G_n, LG_n (соответственно K_n, LK_n) к $F(x)$ на $[ab] \leqslant [AB]$. Допустим, что условие точности по квадратурам G_n, LG_n (соответственно K_n, LK_n) не выполнено. Нужно ответить на вопрос — какая из возможностей: а) переход к квадратуре парной квадратуре G_n $/K_n/$ (§ 1), б) дробление отрезка $[ab]$ — является разумной в смысле экономной тактики интегрирования функции $F(x)$ на $[AB]$.

Переход к парной квадратуре будет оправдан, если мы на отрезке $[ab]$ достигнем требуемой точности (§ 3). С целью отгадать результат применения парной к G_n $/K_n/$ квадратуры K_n (соответственно S_n) будем прогнозировать величину ошибки квадратуры LK_n (соответственно LS_n) на $[ab]$.

Определим критерий перехода к квадратуре K_n из следующих рассуждений: пусть на некотором отрезке $[cd]$ результаты применения квадратур LG_n и LK_n к $F(x)$ не равны нулю. Тогда существуют числа p и q такие, что справедливо

$$|LG_n(cd)| = (d-c)^p \quad \text{и} \quad |LK_n(cd) : LG_n(cd)| = (d-c)^q. \tag{4.1}$$

Предположим теперь, что величины p и q не сильно отличаются для двух отрезков $[cd]$ и $[\alpha\beta]$*, тогда для определения p и q получим уравнения

$$p = \frac{\ln |LG_n(\alpha\beta) : LG_n(cd)|}{\ln [(\beta - \alpha) : (d - c)]} \tag{4.2}$$

$$q = \frac{\ln |[LK_n(\alpha\beta) LG_n(cd)] : [LK_n(cd) LG_n(\alpha\beta)]|}{\ln [(\beta - \alpha) : (d - c)]}. \tag{4.3}$$

Рассмотрим в некотором смысле следующий за $[\alpha\beta]$ отрезок $[ab]$, на котором не выполнено условие точности (3.1) по квадратурам G_n, LG_n. Вычислим значение p на $[ab]$, p' — по (4.2) и $q' = q\,\frac{p'}{p}$. Величину $LK_n(ab)$ прогнозируем с помощью формулы

$$LK_n(ab) \sim LG_n(ab)\,\frac{LK_n(\alpha\beta)}{LG_n(\alpha\beta)} \left(\frac{b - a}{\beta - \alpha}\right)^{q'}. \tag{4.4}$$

В качестве критерия перехода к квадратурам K_n, LK_n берется

$$m_G\,|LG_n(ab)| < Э_G, \tag{4.5}$$

где

$$m_G = k_G \left|\frac{LK_n(\alpha\beta)}{LG_n(\alpha\beta)}\right| \left(\frac{b - a}{\beta - \alpha}\right)^{q'\,**}. \tag{4.6}$$

Повторяя аналогичные рассуждения для квадратур K_n, LK_n, S_n, LS_n, получим критерий перехода к квадратурам S_n, LS_n

$$m_K\,|LK_n(ab)| < Э_K, \tag{4.7}$$

где

$$m_K = k_K \left|\frac{LS_n(\gamma\delta)}{LK_n(\gamma\delta)}\right| \left(\frac{b - a}{\delta - \gamma}\right)^{r'\,***}. \tag{4.8}$$

5. Выбор следующего отрезка

Пусть на некотором отрезке $[a_i b_i]$ достигается требуемая точность и пусть $b_i < B$. Величина $\gamma_i = \frac{b_i - a_i}{l_i}$ (где l_i означает число узлов в квадратуре, с помощью которой была достигнута требуемая точность) характеризует в некотором смысле цену, за которую эта точность была достигнута. Число $\varkappa_i = \gamma_i : \gamma_{i-1}$, (где γ_{i-1} и γ_i — цены на двух последовательных отрезках) называем тенденцией. Вводится число τ_i, принимающее значение 3 (2, 1), если точность на отрезке $[a_i b_i]$ была достигнута по квадратуре G_n (соответственно K_n, S_n). Кроме τ_i, вводится еще σ_i, принимающий значения —2, —1, 0, 1, 2. При $\varkappa_1 = 0$ (тенденция не определена) $\sigma_1 = 0$.

Для определяемого отрезка σ_{i+1} принимает значения:

---

* $d - c \neq [\beta - \alpha]$.

** На $[AB]$ m_G принимается равным k_G^2.

*** В наших расчетах мы не определяли r' из уравнения, а принимали $r' = q'$. На $[AB]$ m_K принимается равным k_K^2. Отрезок $[\gamma\delta]$ аналогичен отрезку $[\alpha\beta]$.

$$\sigma_{i+1} = \begin{cases} \min[\sigma_i + 1, 2], & \text{при } \varkappa_i \geqslant 1 \text{ и условии, что предыдущий прогноз оправдался *} \\ \max[\sigma_i - 1, -2], & \text{при } \varkappa_i < 1 \text{ и условии, что предыдущий прогноз не оправдался} \\ \sigma_i, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

В качестве определяемого отрезка берется $[a_{i+1}b]$, где $a_{i+1} = b_i$ и $b = \min\{b_i + (\tau_{i+1} + \tau_i)(b_i - a_i); B\}$.

6. Принципиальная схема вычислений

В алгоритме пользуются тремя парами квадратур G_n, LG_n, K_n, LK_n и S_n, LS_n. Поскольку узлы уточняющей квадратуры K_n суть четные узлы дополнительной квадратуры S_n, а узлы гауссовой квадратуры G_n суть четные узлы K_n, то все необходимые узлы и исчерпываются узлами квадратуры S_n. Вычисление квадратур желательно провести так, чтобы при вычислении следующей квадратуры использовались уже вычисленные значения функции.

Опишем принципиальную схему вычисления интеграла (1.1) с заданной относительной точностью ε. На отрезке $[AB]$ вычисляются $G_n(AB)$, $LG_n(AB)$, $K_n(AB)$ и $LK_n(AB)$. Проверяется условие точности (3.1) по квадратуре K_n. Если требуемая точность достигнута, $K_n(AB)$ принимается за приближенное значение интеграла (1.1) и процесс вычисления интеграла считается завершенным. Процесс интегрирования завершается еще и в том случае, если будут выполнены критерий перехода (4.8) и условие точности (3.1) по квадратуре S_n на $[AB]$. В остальных случаях происходит дробление отрезка $[AB]$ пополам и на левой половине, т. е. на $[A, \frac{1}{2}(A+B)]$, применяется «полный цикл», состоящий в следующем:

На отрезке $[ab]$ вычисляются $G_n(ab)$ и $LG_n(ab)$ и при выполнении условия (3.1) по G_n, $G_n(ab)$ принимается за приближенное значение интеграла на $[ab]$. Происходит переход к определению следующего отрезка. Если (3.1) по G_n не выполнено, проверяется критерий перехода к квадратурам K_n, LK_n (4.5). При невыполнении (4.5) происходит дробление $[ab]$. Если требуемая точность достигается на отрезке $[ab]$ с помощью квадратуры K_n, т. е. выполняется условие (3.1) по квадратуре K_n, $K_n(ab)$ принимается за значение $\int_a^b F(x)\,dx$. В противном случае проверяется (4.8). При невыполнении (4.8) происходит дробление отрезка $[ab]$. В случае перехода к квадратурам S_n, LS_n поступают аналогично. Проверяется условие (3.1) по S_n и при выполнении (3.1) $S_n(ab)$ принимается за значение $\int_a^b F(x)\,dx$.

Если на $[A, \frac{1}{2}(A+B)]$ не достигается требуемая точность, происходит дальнейшее дробление отрезка, т. е. берется отрезок $[A, \frac{1}{4}(3A+B)]$ и на нем применяется «полный цикл» и т. д. Пусть на некотором $[Ab_1]$ достигается требуемая точность. Определяется следующий отрезок $[a_2b]$,

* Т. е. на прогнозированном отрезке была достигнута точность (§ 3).

где $a_2 = b_1$ (§ 5). На нем применяется «полный цикл». В случае недостижения требуемой точности на $[a_2 b]$ происходит дробление отрезка $[a_2 b]$ пополам с применением на левой половине «полного цикла» и т. д., пока на некотором шагу на $[a_2 b_2]$ не достигается требуемая точность. Определяется следующий отрезок и т. д., пока b_S не станет равным B.

Анализируем, достаточно ли оценки $\int\limits_A^B F(x)\,dx$ по квадратуре K_n для образования $Э_R$ в (3.1). В наших расчетах в качестве условия было использовано

$$0{,}1 \left| \int\limits_A^B F(x)\,dx \right| < |K_n(AB)| < 10 \left| \int\limits_A^B F(x)\,dx \right|.$$

Если введенное условие не выполнено, полученное значение интеграла (1.1) будет использовано для определения $Э_R$ в (3.1) и весь процесс интегрирования повторится на $[AB]$.

Заключение

Мы описали некоторые идеи ускорения алгоритма интегрирования. В виде программы был реализован несколько более совершенный алгоритм.

С целью сравнения упомянутого алгоритма с другими алгоритмами был проведен контрольный счет. Сравнению подвергались наиболее распространенный алгоритм — обобщенная схема Гаусса [1, 4, 11] и наилучший из известных нам алгоритм М. З. Розенфельд [9]. Наш алгоритм по сравнению с обобщенной схемой Гаусса всегда дает значительный выигрыш в числе обращений к подынтегральной функции. По сравнению с алгоритмом М. З. Розенфельд выигрыш существенный (в среднем в 2—3 раза).

Преимущество алгоритма увеличивается с повышением точности интегрирования и с переходом к более сложным функциям.

Выражаю благодарность А. С. Кронроду за постоянное внимание к этой работе и многочисленные обсуждения на различных ее этапах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Библиотека Б—61, ч. I и II, ИТЭФ, М., 1965.
2. Кронрод А. С., Об интегрировании с контролем точности, ДАН СССР, **2**, 154 (1964).
3. Кронрод А. С., Узлы и веса квадратурных формул, М., 1964.
4. Пукк Р. А., Ж. вычисл. матем. и математич. физики, **5**, № 2, 185—198 (1965).
5. Крылов В. И., Приближенное вычисление интегралов, М., 1959.
6. Березин И. С., Жидков Н. П., Методы вычислений, т. I, М., 1965.
7. Никольский С. М., Квадратурные формулы, М., 1958.
8. Segö, Mathematische Annalen, **110**, H. 4, 501—513 (1934).
9. Розенфельд М. З., Интеграл особенный. Библиотека Б—61, ч. I и II, ИТЭФ, М., 1965.

10. Бахвалов Н. С., Об определении начального шага и оценке главного члена погрешности при численном интегрировании с автоматическим выбором шага, Сб. Вычислительные методы и программирование, вып. 1, М., 1962.
11. Philip J. Davis, On the Numerical Integration of Periodic Analytic Functions, Сб. On Numerical Approximation, Madison, 1959.

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
1/VI 1967

R. PUKK

MÕNINGATEST INTEGREERIMISPROTSESSI KIIRENDAVATEST VÕTETEST

Käesolevas artiklis kirjeldatav algoritm annab võimaluse arvutada $\int_A^B F(x)dx$ väärtuse etteantud täpsusega ja võimalikult vähese integraalialuse funktsiooni arvutamistega. Kasutatakse heuristilise programmeerimise meetodeid ökonoomse taktika leidmiseks sõltuvalt funktsiooni muutumise iseloomust. Algoritmi võrreldi üldistatud Gaussi meetodiga ja Rosenfeldi integreerimisalgoritmiga.

R. PUKK

SOME IDEAS OF THE ACCELERATION PROCESS OF INTEGRATION

The problem of the creation of an algorithm for the evaluation of the integrals $\int_A^B F(x)dx$ with the given accuracy by using possibly few numerical values of $F(x)$ is discussed. Some ideas of the artificial intelligence theory are used to choose the best tactics of integration according to the properties of the function. The algorithm is compared with the modified Gaussian scheme and Rosenfeld's algorithm of integration.