Liet. matem. rink., **44**, *spec. nr.*, 2004, 660–664

Niutono ir Koteso kvadratūrinių formulių paklaidos įvertinimas

Kostas PLUKAS, Danutė PLUKIENĖ (KTU)
el. paštas: kostas.plukas@ktu.lt

1. Įvadas

Nagrinėsime integralo $R = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ apskaičiavimo skaitiniais metodais uždavinį [1–4].

Niutono ir Koteso kvadratūrinių formulių esmė yra ta, kad pointegralinė funkcija $y = f(x)$ keičiama Lagranžo interpoliaciniu polinomu $F(x)$, einančiu per taškus (x_i, y_i), čia $y_i = f(x_i)$, o x_i – interpoliavimo mazgai, ir lakoma,kad

$$R = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b F(x)\,\mathrm{d}x = \sum_i w_i y_i. \tag{1}$$

n-osios eilės Niutono ir Koteso kvadratūrinės formulės interpoliavimo mazgai apskaičiuojami pagal formulę: $x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = \overline{0, n}$, čia $x_0 = a$, $h = (b-a)/n$, $x_n = b$.

Norėdami apskaičiuoti $R = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ reikšmę norimu tikslumu, turėsime pasirinkti kvadratūrinę formulę, integravimo strategiją ir paklaidos įverčio formulę. Dažniausiai naudojamos lyginės eilės Niutono ir Koteso kvadratūrinės formulės, adaptyviojo integravimo strategija, o paklaida Δ įvertinama Rungės taisykle [1–4]

$$\Delta = \left| \frac{R_{h/2} - R_h}{2^p - 1} \right|, \tag{2}$$

čia $R_{h/2}$ ir R_h – integralo $R = \int_\alpha^\beta f(x)\,\mathrm{d}x$ apytikslės reikšmės, gautos taikant kurią nors kvadratūrinę formulę intervalo $[a, b]$ daliniame intervale $[\alpha, \beta]$, kai integravimo žingsnis atitinkamai yra $h/2$ ir h, o p priklauso nuo kvadratūrinės formulės eilės. Lyginės eilės ($n = 2l$) Niutono ir Koteso kvadratūrinėms formulėms $p = n + 2$.

(2)-oji formulė turi du trūkumus:

- tam pačiam integravimo intervalo daliniam intervalui reikia du kartus taikyti kvadratūrinę formulę su skirtingais integravimo žingsniais,
- pagal (2) formulę apskaičiuotas paklaidos įvertis paprastai yra mažesnis už tikrąją paklaidą, todėl apskaičiuota integralo reikšmė dažnai norimo tikslumo netenkina.

Darbe siūlomas kitas Niutono ir Koteso kvadratūrinių formulių paklaidos įvertinimo metodas, neturintis minėtų trūkumų.

2. Kvadratūrinės formulės paklaidos įvertis

Kaip minėjome, kvadratūrinės formulės paklaidos įvertis pagal (2) formulę yra per daug „optimistinis", t.y., dažnai mažesnis negu modulis skirtumo tarp integralo reikšmės, apskaičiuotos pagal kvadratūrinę formulę, ir tikslios reikšmės. Todėl paklaidos įvertį siūlome apskaičiuoti įdėtųjų formulių metodu, kuris taikomas apskaičiuoti lokaliąją paklaidą, sprendžiant paprastąsias diferencialines lygtis [6].

Tarkime, kad Q yra p-osios eilės kvadratūrinė formulė, sukonstruota naudojant interpoliavimo mazgus $x_0 = a,\ x_1, x_2 \dots, x_n = b$, o Q_1 – $(p-1)$-osios eilės kvadratūrinė formulė, sukonstruota naudojant tuos pačius interpoliavimo mazgus, išskyrus mazgą x_k, $k \in [0, n]$, kuris paprastai parenkamas taip, kad formulės Q_1 paklaida būtų mažiausia. Kvadratūrinė formulė Q_1 lengvai apskaičiuojama neapibrėžtinių koeficientų metodu, o jos paklaida – remiantis interpoliacinio polinomo liekamuoju nariu ir apibendrintąja vidurinių reikšmių teorema [1, 5, 7].

Tarkime, kad Δ ir Δ_1 yra kvadratūrinių formulių Q ir Q_1 paklaidos, o R_Q ir R_{Q_1} integralo $R = \int_a^b f(x)\,dx$ reikšmės, apskaičiuotos pagal kvadratūrines formules Q ir Q_1.

Tada $R = R_Q + \Delta = R_{Q_1} + \Delta_1$. Iš pastarosios lygybės gauname,

$$|R_Q - R_{Q_1}| = |\Delta_1 - \Delta|. \tag{3}$$

Jei $f^{(p)}(x) = \text{const}$, kai $x \in [a, b]$, tai $|\Delta_1| = |R_Q - R_{Q_1}|$. Vadinasi, dydį

$$\delta_p = |R_Q - R_{Q_1}| \tag{4}$$

galima laikyti kvadratūrinės formulės Q paklaidos įverčiu.

Šis įvertis turi tokius privalumus:

- jo išraiška pilnai sutampa su (1) formule tik su kitais tiesinio darinio koeficientais, todėl nereikia papildomai skaičiuoti $R_{h/2}$;
- šis įvertis yra „pesimistiškesnis" lyginant su (2) formule, t.y., paprastai įvertis yra didesnis už kvadratūrinės formulės Q paklaidos modulio reikšmę, nes žemesnės eilės kvadratūrinės formulės paklaidos modulis paprastai yra didesnis nei aukštesnės eilės kvadratūrinės formulės paklaidos modulis, todėl naudodami šį įvertį beveik visada apskaičiuosime integralo reikšme norimu tikslumu;
- kadangi $R_Q = R_{Q_1} + \Delta_1 - \Delta$, tai, norint apskaičiuoti integralo reikšmę tikslumu ε, tikslinga elgtis taip: taikydami adaptyviojo integravimo strategiją, (4) formulės pagalba rasime integravimo intervalo $[a, b]$ didžiausią kairįjį dalinį intervalą $[\alpha, \beta]$, kuriame $|R_Q - R_{Q_1}| \leqslant |(\beta - \alpha)/(b - a)|\varepsilon$ ir šiame daliniame intervale kvadratūrinės formulės Q pagalba apskaičiuosime integralo reišmę. Po šio veiksmo turėsime tą patį uždavinį tik siauresniame integravimo intervale $[a, b]$, čia $a = \beta$.

1-os lentelės eilutėse patalpinti lyginės eilės Niutono ir Koteso kvadratūrinių formulių (formulė Q) koeficientai, kvadratūrinių formulių, gautų atmetus mazgą x_k, koeficientai (formulė Q_1) ir paklaidos δ_p koeficientai. Stulpelis p žymi kvadratūrinių formulių eilę, stulpelis Δ – jų teorines paklaidas, o eilutė δ_p – paklaidų įverčio koeficientus.

1 lentelė. Niutono ir Koteso kvadratūros paklaidos įverčio formulė $|\Delta| \approx \delta_n = |h(w_0 y_0 + w_1 y_1 + \ldots + w_n y_n)|$, čia $w_i = w_{n-i}$, $i = \overline{0, n}$

p	w_0	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	Δ
4	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$		$\frac{-128}{21}\frac{f^{(6)}(\xi)}{6!}h^7$
3	$\frac{2}{9}$	$\frac{16}{9}$	0	$\frac{16}{9}$	$\frac{2}{9}$		$\frac{32}{15}\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}h^5$
δ_4	$\frac{4}{45}$	$\frac{-16}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{-16}{45}$	$\frac{4}{45}$		
6	$\frac{41}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{272}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{-1296}{5}\frac{f^{(8)}(\xi)}{8!}h^9$
5	$\frac{14}{50}$	$\frac{81}{50}$	0	$\frac{110}{50}$	0	$\frac{81}{50}$	$\frac{324}{35}\frac{f^{(6)}(\xi)}{6!}h^7$
δ_6	$\frac{9}{700}$	$\frac{-54}{700}$	$\frac{135}{700}$	$\frac{-180}{700}$	$\frac{135}{700}$	$\frac{-54}{700}$	
8	$\frac{3956}{14175}$	$\frac{23552}{14175}$	$\frac{-3712}{14175}$	$\frac{41984}{14175}$	$\frac{-18160}{14175}$	$\frac{41984}{14175}$	$\frac{-606208}{33}\frac{f^{(10)}(\xi)}{10!}h^{11}$
7	$\frac{1908}{6615}$	$\frac{10496}{6615}$	0	$\frac{16128}{6615}$	$\frac{-4144}{6615}$	$\frac{16128}{6615}$	$\frac{-118784}{315}\frac{f^{(8)}(\xi)}{8!}h^9$
δ_8	$\frac{-928}{99225}$	$\frac{7424}{99225}$	$\frac{-25984}{99225}$	$\frac{51968}{99225}$	$\frac{-64960}{99225}$	$\frac{51968}{99225}$	
10	$\frac{80335}{299376}$	$\frac{531500}{299376}$	$\frac{-242625}{299376}$	$\frac{1362000}{299376}$	$\frac{-1302750}{299376}$	$\frac{2136840}{299376}$	$\frac{-538540000}{273}\frac{f^{(12)}(\xi)}{12!}h^{13}$
9	$\frac{11690}{40824}$	$\frac{65125}{40824}$	0	$\frac{97500}{40824}$	$\frac{-23250}{40824}$	$\frac{106110}{40824}$	$\frac{-6470000}{99}\frac{f^{(10)}(\xi)}{10!}h^{11}$
δ_{10}	$\frac{-16175}{898128}$	$\frac{161750}{898128}$	$\frac{-727875}{898128}$	$\frac{1941000}{898128}$	$\frac{-3396750}{898128}$	$\frac{4076100}{898128}$	

3. Eksperimentinis tyrimas

Buvo sudaryta 8-os eilės anksčiau aprašytą adaptyviojo integravimo strategiją realizuojanti paskalinė prcedūra *nc8*. Paklaidos įvertis buvo apskaičiuojamas pagal formulę (žr. 1 lentelę)

$$\delta_8 = \left| \frac{928}{99225} h(y_0 - 8y_1 + 28y_2 - 56y_3 + 70y_4 - 56y_5 + \cdots + y_8) \right|.$$

2-oje, 3-oje ir 4-oje lentelėse patalpinti atitinkamai funkcijų $f_1(x) = 1/x$ intervale $[0,0001; 10]$, $f_2(x) = \frac{1}{(x-0,3)^2+0,01} + \frac{1}{(x-0,9)^2+0,04} - 6$ intervale $[0; 2]$ ir $f_3(x) = \sqrt{x}$ intervale $[0; 1]$ (žr. [4]) integravimo rezultatai, naudojant procedūrą *nc8* ir tos pačios eilės procedūrą *rc8* (žr. [4]), kurioje paklaidos įvertis apskaičiuojamas pagal (2) formulę, o taip pat 8-os eilės MATLAB'o procedūrą *quad8*.

Jei integravimo intervalo $[a, b]$ daliniame intervale $[\alpha, \beta]$ galioja nelygybė $\frac{|R_{\frac{h}{2}} - R_h|}{1023} \leqslant |\frac{\beta-\alpha}{b-a}|\varepsilon$, tai procedūroje *rc8* integralo $\int_\alpha^\beta f(x)\,\mathrm{d}x$ reikšmė prilyginama dydžiui $R_{\frac{h}{2}} + \frac{R_{\frac{h}{2}} - R_h}{1023}$, čia ε – integravimo tikslumas.

Lentelėse stulpeliai „*nn*“ žymi panaudotų pointegralinės funkcijos reikšmių skaičių.

Kaip matyti iš skaičiavimo rezultatų, taikant darbe pasiūlytą paklaidos įverčio formulę (procedūra *nc8*), abiejų integralų reikšmės visais atvejais buvo apskaičiuotos

2 lentelė. $R = \int_{0,0001}^{10} \frac{1}{x}\,dx = 11,51292546497023\ldots$

ε	*quad8*		*rc8*		*nc8*	
	nn	*R*	*nn*	*R*	*nn*	*R*
10^{-3}	177	12,039939489	17	1746,2576403	153	11,512925886
10^{-4}	177	12,039939489	273	11,512925469	201	11,512925800
10^{-5}	209	12,039993949	273	11,512925469	249	11,512925669
10^{-6}	257	12,039993948	289	11,512925466	337	11,512925567
10^{-7}	321	12,039993481	289	11,512925466	457	11,512925465

3 lentelė. $R = \int_0^2 \left(\frac{1}{(x-0,3)^2+0,01} + \frac{1}{(x-0,9)^2+0,04} - 6\right) dx = 29,32621380439114\ldots$

ε	*quad8*		*rc8*		*nc8*	
	nn	*R*	*nn*	*R*	*nn*	*R*
10^{-3}	113	29,326217341	17	29,673226659	65	29,326239639
10^{-4}	145	29,326213863	33	29,982661778	89	29,326218004
10^{-5}	177	29,326213799	65	29,326252785	113	29,326213844
10^{-6}	225	29,326213803	81	29,326283645	145	29,326213848

4 lentelė. $R = \int_0^1 \sqrt{x}\,dx = 0.6666666666\ldots$

ε	*quad8*		*rc8*		*nc8*	
	nn	*R*	*nn*	*R*	*nn*	*R*
10^{-3}	177	0,666666638	17	0,665742763	9	0,664048795
10^{-4}	145	0,666666638	17	0,665742763	25	0,666339432
10^{-5}	177	0,6666666389	17	0,665742763	73	0,666666027
10^{-6}	225	0,666666638	45	0,665742763	129	0,666666666
10^{-7}	225	0,666666638	161	0,666666587	185	0,666666666

teisingai, ko negalima pasakyti apie rezultatus, gautus taikant procedūras *rc8* bei *quad8*.

4. Išvados

1. Pasiūlyta nauja kvadratūrinių formulių paklaidos įverčio formulė, pagrįsta įdėtųjų formulių metodu.
2. Pateikta paklaidos įverčio formulė skirtingai nei (2)-oji (Rungės) formulė įgalina sudaryti paprestesnes ir efektyvesnes adaptyviojo integravimo strategiją realizuojančias procedūras.

Literatūra

1. R. Čiegis, V. Būda, *Numerical Mathematic*, TEV, Vilnius (1997) (in Lithuanian).
2. J.D. Faires, R.L. Burden, *Numerical Methods*, PWS Publishing company, Boston (1993).
3. G. Recktenwald, *Numerical Methods with MATLAB: Implementations and Applications*, Prentice-Hall, New-Jersey (2000).
4. G.E. Forsythe, M.A. Malcolm, C.B. Moler, *Computer Methods for Mathematical Computations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ (1977).
5. R.W. Hamming, *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, Mc Graw-Hill, New-York (1962).
6. E. Hairer, S.P. Norsett, G. Wanner, *Solving Ordinary Differencial Equations I Nonstiff Problems*, Moscow (1990) (in Russian).
7. I.S. Berezin, N.P. Zidkov, *Numerical Methods*, Nauka, Moscow (1966) (in Russian).

SUMMARY

K. Plukas, D. Plukienė. Truncation error estimation for Newton-Cotes quadrature formulas

Theoretical and practical aspects of truncation error estimation for Newton-Cotes quadrature formulas are discussed in this paper.

Keywords: definite integral, integrand function, quadrature formula, error estimate, addaptive procedure.