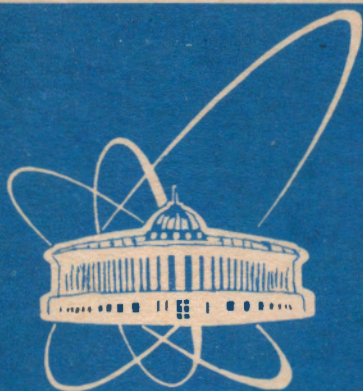


95-505



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P11-95-505

Е.П.Жидков, Ю.Ю.Лобанов, В.Д.Рушай

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РОМБЕРГА
ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ТОЧНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЯ
КРАТНЫХ ИНТЕГРАЛОВ

1995

Введение

При вычислении одномерных интегралов известен метод Ромберга [1,2], который, в определенных случаях, позволяет уменьшать погрешность вычислений по некоторой квадратурной формуле за счет образования линейной комбинации полученных в процессе вычислений приближенных значений интеграла.

В данной работе проводятся аналогичные построения для кратных интегралов в случае, когда они вычисляются по приближенным формулам, которые являются прямым произведением одномерных квадратурных формул.

Обозначим проблемы, возникающие при вычислении кратных интегралов методом повторного интегрирования.

Пусть функция $f(x_1, \dots, x_p)$ задана в p -мерном параллелепипеде $\Omega = \{a_1 \leq x_1 \leq b_1, \dots, a_p \leq x_p \leq b_p\}$. Будем вычислять интеграл

$$I(f) = \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_p}^{b_p} f(x_1, \dots, x_p) dx_1 \dots dx_p \quad (1)$$

по приближенной формуле

$$S(f) = h_1 \dots h_p \sum_{j_1=0}^{N_1} \dots \sum_{j_p=0}^{N_p} D_{j_1} \dots D_{j_p} f(a_1 + j_1 h_1, \dots, a_p + j_p h_p), \quad (2)$$

которая является прямым произведением некоторых одномерных составных квадратурных формул S_k с постоянными шагами интегрирования h_k :

$$S_k(I_k) = h_k \sum_{j_k=0}^{N_k} D_{j_k} I_k(x_1, \dots, x_{k-1}, a_k + j_k h_k), \quad (3)$$

$$k = 1, \dots, p.$$

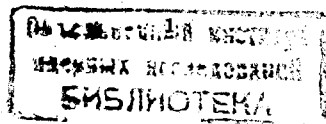
Здесь N_k - число разбиений отрезка интегрирования $[a_k, b_k]$,

$$h_k = \frac{b_k - a_k}{N_k},$$

D_{j_k} - коэффициенты формулы $S_k(I_k)$,

$$I_k(x_1, \dots, x_k) = \int_{a_{k+1}}^{b_{k+1}} \dots \int_{a_p}^{b_p} f(x_1, \dots, x_p) dx_{k+1} \dots dx_p,$$

$$I_p(x_1, \dots, x_p) \equiv f(x_1, \dots, x_p).$$



Подставив это выражение при $k = 1, \dots, p$ в равенство (4), получим

$$R = \sum_{m=1}^l G_{m1}(I_1)(h_1)^{2m} + r_1(h_1) + h_1 \sum_{j_1=0}^{N_1} D_{j_1} \left(\sum_{m=1}^l G_{m2}(I_2)(h_2)^{2m} + r_2(h_2) \right) + \dots + h_1 \dots h_{p-1} \sum_{j_1=0}^{N_1} \dots \sum_{j_{p-1}=0}^{N_{p-1}} D_{j_1} \dots D_{j_{p-1}} \left(\sum_{m=1}^l G_{mp}(I_p)(h_p)^{2m} + r_p(h_p) \right).$$

Введем обозначения :

$$B_{mk}(I_k) = h_1 \dots h_{k-1} \sum_{j_1=0}^{N_1} \dots \sum_{j_{k-1}=0}^{N_{k-1}} D_{j_1} \dots D_{j_{k-1}} G_{mk}(I_k),$$

$$B_{m1}(I_1) \equiv G_{m1}(I_1), \quad k = 1, \dots, p.$$

Тогда выражение для R будет иметь вид

$$R = \sum_{m=1}^l B_{m1}(I_1)(h_1)^{2m} + r_1(h_1) + \sum_{m=1}^l B_{m2}(I_2)(h_2)^{2m} + h_1 \sum_{j_1=0}^{N_1} D_{j_1} r_2(h_2) + \dots + \sum_{m=1}^l B_{mp}(I_p)(h_p)^{2m} + h_1 \dots h_{p-1} \sum_{j_1=0}^{N_1} \dots \sum_{j_{p-1}=0}^{N_{p-1}} D_{j_1} \dots D_{j_{p-1}} r_p(h_p) = \\ = \sum_{k=1}^p \sum_{m=1}^l B_{mk}(I_k)(h_k)^{2m} + R^*,$$

где

$$R^* = r_1(h_1) + h_1 \sum_{j_1=0}^{N_1} D_{j_1} r_2(h_2) + \dots + h_1 \dots h_{p-1} \sum_{j_1=0}^{N_1} \dots \sum_{j_{p-1}=0}^{N_{p-1}} D_{j_1} \dots D_{j_{p-1}} r_p(h_p).$$

Предположим теперь, что интеграл (1) вычисляется $l+1$ раз по p -мерной формуле трапеций (2) при значениях

$$N_1 = N_1, \lambda N_1, \dots, \lambda^l N_1,$$

$$N_p = N_p, \lambda N_p, \dots, \lambda^l N_p,$$

где λ - некоторая константа.

Введем индекс i для обозначения номера соответствующего вычисления интеграла при значениях N_1^i, \dots, N_p^i . Соответственно, все величины, зависящие от N_k^i , также будут иметь индекс i . Тогда числа разбиения N_k^i и шаги интегрирования h_k^i можно выразить через степени числа λ следующим образом :

$$\begin{aligned} N_k^i &= \lambda^i N_k^0, \\ h_k^i &= \lambda^{-i} h_k^0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$k = 1, \dots, p, \quad i = 0, \dots, l.$$

Имеем равенства

$$\begin{aligned} I(f) &= S_i(f) + R_i(f) = \\ &= S_i(f) + \sum_{k=1}^p \sum_{m=1}^l B_{mki}(I_k)(h_k^i)^{2m} + R_i^*, \quad i = 0, \dots, l. \end{aligned}$$

Образует линейную комбинацию этих соотношений с некоторыми коэффициентами c_i , потребовав, чтобы

$$\sum_{i=0}^l c_i = 1. \quad (7)$$

Получим

$$I(f) = \sum_{i=0}^l c_i S_i(f) + \sum_{k=1}^p \sum_{m=1}^l \left(\sum_{i=0}^l c_i B_{mki}(I_k)(h_k^i)^{2m} \right) + \sum_{i=0}^l c_i R_i^*. \quad (8)$$

Введем обозначения :

$$P_{mk}(I_k) = \max_{x_1, \dots, x_{k-1}} |G_{mk}(I_k)|, \quad k = 1, \dots, p, \quad m = 1, \dots, l.$$

Тогда для коэффициентов $B_{mki}(I_k)$ будем иметь

$$\begin{aligned} |B_{mki}(I_k)| &\leq h_1^i \dots h_{k-1}^i \sum_{j_1=0}^{N_1^i} \dots \sum_{j_{k-1}=0}^{N_{k-1}^i} D_{j_1} \dots D_{j_{k-1}} |G_{mk}(I_k)| \leq \\ &\leq P_{mk}(I_k) \prod_{n=1}^{k-1} (b_n - a_n) \frac{1}{N_1^i} \dots \frac{1}{N_{k-1}^i} \sum_{j_1=0}^{N_1^i} \dots \sum_{j_{k-1}=0}^{N_{k-1}^i} D_{j_1} \dots D_{j_{k-1}}. \end{aligned}$$

Для p -мерной формулы трапеций выполняется равенство

$$\frac{1}{N_1^i} \dots \frac{1}{N_{k-1}^i} \sum_{j_1=0}^{N_1^i} \dots \sum_{j_{k-1}=0}^{N_{k-1}^i} D_{j_1} \dots D_{j_{k-1}} = 1 \quad (9)$$

$$\text{при } k = 2, \dots, p, \quad i = 0, \dots, l.$$

Поэтому $|B_{mki}(I_k)| \leq P_{mk}(I_k) \prod_{n=1}^{k-1} (b_n - a_n)$ для $k = 2, \dots, p, m = 1, \dots, l$, $|B_{m1i}(I_1)| \leq P_{m1}(I_1)$, $i = 0, \dots, l$. Тогда с учетом (6) справедливо неравенство

$$\begin{aligned} |I(f) - \sum_{i=0}^l c_i S_i(f) - \sum_{i=0}^l c_i R_i^*| &\leq \\ &\leq \sum_{m=1}^l P_{m1}(I_1)(h_1^0)^{2m} \left| \sum_{i=0}^l c_i \lambda^{-2im} \right| + \\ &+ \sum_{k=2}^p \sum_{m=1}^l P_{mk}(I_k) \prod_{n=1}^{k-1} (b_n - a_n) (h_k^0)^{2m} \left| \sum_{i=0}^l c_i \lambda^{-2im} \right|. \end{aligned} \quad (10)$$

Потребуем, чтобы выполнялись условия

$$\sum_{i=0}^l c_i \lambda^{-2im} = 0$$

при $m = 1, \dots, l$.

Эти условия совместно с условием (7) образуют систему из $l + 1$ линейно независимых уравнений, из которой определяются $l + 1$ неизвестных коэффициентов c_i . Подставив эти коэффициенты в неравенство (10), получим

$$I(f) = \sum_{i=0}^l c_i S_i(f) + R_{\text{Ромб.}}, \quad (11)$$

где $R_{\text{Ромб.}} = \sum_{i=0}^l c_i R_i^*$,

$$R_i^* = r_1(h_1^i) + h_1^i \sum_{j_1=0}^{N_1^i} D_{j_1} r_2(h_2^i) + \dots + h_1^i \dots h_{p-1}^i \sum_{j_1=0}^{N_1^i} \dots \sum_{j_{p-1}=0}^{N_{p-1}^i} D_{j_1} \dots D_{j_{p-1}} r_p(h_p^i),$$

$$r_k(h_k^i) = -\gamma_{2l+2} (I_k(x_1, \dots, x_{k-1}, \xi_k))_{x_k^{2l+2}} (h_k^i)^{2l+2} (b_k - a_k).$$

Сделаем оценку остаточного члена $R_{\text{Ромб.}}$. Имеем

$$\max_{x_1, \dots, x_k} | (I_k(x_1, \dots, x_k))_{x_k^{2l+2}} | = \max_{x_1, \dots, x_k} \left| \int_{a_{k+1}}^{b_{k+1}} \dots \int_{a_p}^{b_p} f_{x_k^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) dx_{k+1} \dots dx_p \right| \leq$$

$$\leq \max_{\Omega} | f_{x_k^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) | \prod_{n=k+1}^p (b_n - a_n) \text{ при } k = 1, \dots, p-1.$$

При $k = p$ $I_p(x_1, \dots, x_p) \equiv f(x_1, \dots, x_p)$ и

$$\max_{x_1, \dots, x_p} | (I_p(x_1, \dots, x_p))_{x_p^{2l+2}} | = \max_{\Omega} | f_{x_p^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) |.$$

Тогда для величины $r_k^* = \max_{x_1, \dots, x_k} | r_k |$ справедливо неравенство

$$r_k^*(h_k^i) \leq |\gamma_{2l+2}| \max_{\Omega} | f_{x_k^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) | \prod_{n=k}^p (b_n - a_n) (h_k^i)^{2l+2},$$

$k = 1, \dots, p$. Тогда с учетом (9) получим

$$| R_i^* | \leq r_1^*(h_1^i) + (b_1 - a_1) r_2^*(h_2^i) + \dots + (b_1 - a_1) \dots (b_{p-1} - a_{p-1}) r_p^*(h_p^i) =$$

$$= |\gamma_{2l+2}| \prod_{n=1}^p (b_n - a_n) \sum_{k=1}^p \max_{\Omega} | f_{x_k^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) | (h_k^i)^{2l+2}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} | R_{\text{Ромб.}} | &= \left| \sum_{i=0}^l c_i R_i^* \right| \leq \sum_{i=0}^l | c_i R_i^* | = \sum_{i=0}^l | c_i | | R_i^* | \leq \\ &\leq |\gamma_{2l+2}| \prod_{n=1}^p (b_n - a_n) \sum_{k=1}^p \max_{\Omega} | f_{x_k^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) | \sum_{i=0}^l | c_i | (h_k^i)^{2l+2}. \end{aligned}$$

С учетом (6) имеем

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^l | c_i | (h_k^i)^{2l+2} &= \sum_{i=0}^l | c_i | (\lambda^{-i} h_k^0)^{2l+2} = (h_k^0)^{2l+2} \sum_{i=0}^l | c_i | \lambda^{-2i(l+1)} = \\ &= (h_k^0)^{2l+2} \beta_l, \text{ где } \beta_l = \sum_{i=0}^l | c_i | \lambda^{-2i(l+1)}. \end{aligned}$$

В итоге

$$| R_{\text{Ромб.}} | \leq |\gamma_{2l+2}| \beta_l \prod_{n=1}^p (b_n - a_n) \sum_{k=1}^p \max_{\Omega} | f_{x_k^{2l+2}}(x_1, \dots, x_p) | (h_k^0)^{2l+2}. \quad (12)$$

В одномерном случае квадратура $I(f) \simeq \sum_{i=0}^l \alpha_i S_i(f)$ называется формулой Ромберга. Здесь $S_i(f)$ - приближенные значения интеграла, вычисленные по некоторой квадратурной формуле при различных шагах интегрирования h_i . Как видно из равенства (11), выражение для кратных интегралов имеет такой же вид, причем, если в одномерном случае числа h_i образуются по закону $h_i = \lambda^{-i} h_0$, то коэффициенты α_i будут совпадать с соответствующими коэффициентами c_i для многомерного случая, где, как предположено, также выполняются условия $h_k^i = \lambda^{-i} h_k^0$, $k = 1, \dots, p$, $i = 0, \dots, l$.

Из анализа оценки остатка $R_{\text{Ромб}}$ (12) видно, что увеличение числа последовательных вычислений l интеграла $I(f)$ может дать значительное уменьшение погрешности результата. Однако с ростом кратности интеграла p количество его последовательных вычислений $S_0(f), \dots, S_l(f)$ сильно ограничивается, т.к. число областей разбиения M области интегрирования Ω растет с увеличением l , как $M = \text{const} \lambda^{lp}$. Пропорционально этому растет и объем вычислений. Из этих рассуждений можно сделать вывод, что при увеличении l в некоторых пределах, зависящих от кратности интеграла, быстродействия ЭВМ и самой подынтегральной функции, можно ожидать получение результата с более высокой точностью.

2. Алгоритм вычислений

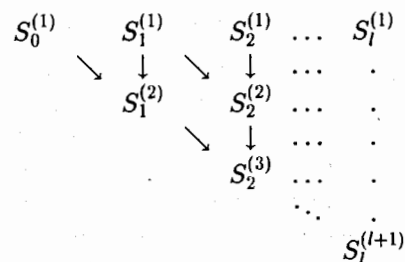
На основе полученных формул была написана программа, которая позволяет вычислять интегралы кратности $p = 1, \dots, 6$. Поскольку, как указыва-

лось ранее, коэффициенты формулы Ромберга (11) в одномерном и многомерном случаях совпадают, в программе использован известный алгоритм вычисления одномерных интегралов методом Ромберга [1] при $\lambda = 2$.

В многомерном случае этот алгоритм состоит в следующем. По p -мерной формуле трапеций (2) вычисляются несколько первых значений интеграла $S_i^{(1)}(f)$ (число в скобках выражает степень точности квадратурной формулы) при шагах интегрирования $h_k^i = 2^{-i}h_k^0$, $k = 1, \dots, p$, $i = 0, \dots, l$. В данной программе максимальное значение $l_{max} = 6$. Начальные шаги интегрирования h_k^0 могут задаваться независимо по каждой переменной, исходя из вида подынтегральной функции и требуемой точности вычислений. При каждом i после вычисления $S_i^{(1)}(f)$ последовательно определяются $S_i^{(2)}(f), \dots, S_i^{(i+1)}(f)$ по рекуррентной формуле

$$S_i^{(j)} = S_i^{(j-1)} + (S_i^{(j-1)} - S_{i-1}^{(j-1)}) / (2^{2(j-1)} - 1).$$

Последовательность этих вычислений наглядно представляется схемой



Вычисление $S_i^{(j)}$ продолжается до тех пор, пока при некотором j не выполнится условие

$$\min_i |S_i^{(j)} - S_i^{(j-1)}| \leq \epsilon_{абс} \quad (13)$$

либо условие

$$\min_i \frac{|S_i^{(j)} - S_i^{(j-1)}|}{|S_i^{(j)}|} \leq \epsilon_{отн}, \quad (14)$$

где одну из погрешностей $\epsilon_{абс}, \epsilon_{отн}$ задает пользователь. Результатом считается значение $S_i^{(j)}$, удовлетворяющее указанному условию. Исключение составляют два первых члена $S_0^{(1)}$ и $S_1^{(1)}$. Для них условия (13) и (14) соответственно принимают вид $|S_0^{(1)} - S_1^{(1)}| \leq \epsilon_{абс}$ и $|S_0^{(1)} - S_1^{(1)}| / |S_1^{(1)}| \leq \epsilon_{отн}$.

Таким образом, в данной программе выбрана вертикальная схема сравнения, в отличие от горизонтальной, в которой сравнение производится

при фиксированном j для двух последовательных значений $S_i^{(j)}$ и $S_{i-1}^{(j)}$. Вертикальная схема в некоторых случаях позволяет избежать вычисления следующего столбца $S_{i+1}^{(1)}, \dots, S_{i+1}^{(i+2)}$, что дает значительную экономию счетного времени.

Условие (13) или (14) может быть достигнуто раньше, чем будет получено наилучшее приближение интеграла $S_i^{(i+1)}$, соответствующее данному номеру i . Поэтому в программе предусмотрена возможность вычисления значения $S_i^{(i+1)}$, которое может считаться наилучшим достигнутым значением интеграла.

В одномерном случае каждый член ряда $S_i^{(1)}$, кроме начального $S_0^{(1)}$, вычисляется с учетом предыдущего по формуле

$$S_i^{(1)} = S_{i-1}^{(1)} / 2 + \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i-1} \left(a + \frac{2j-1}{N_i} (b-a) \right),$$

где a, b - пределы интегрирования. Таким образом, подынтегральная функция $f(x)$ вычисляется каждый раз только в новых точках x , что вдвое уменьшает объем вычислений. В многомерном случае доля старых точек в общем количестве точек, в которых необходимо вычислить функцию $f(x_1, \dots, x_p)$, чтобы определить значение $S_i^{(1)}$, быстро уменьшается с ростом кратности интеграла. Поэтому запоминание и использование уже вычисленных значений подынтегральной функции эффективно лишь при небольших кратностях p . В данной программе это предусмотрено для кратностей $p = 1, 2$, что частично используется и при вычислении интегралов большей кратности.

Количество l вычисленных членов ряда $S_i^{(1)}$ определяется условием (13) или (14) и зависит от начальных чисел разбиений N_k^0 по переменным x_1, \dots, x_p . Из оценки остатка метода Ромберга (12) видно, что при переходе к каждому следующему члену ряда $S_i^{(1)}$ точность результата возрастает скачкообразно. Вследствие этого изменение величин N_k^0 неоднозначно сказывается на процессе вычислений. Увеличение значений N_k^0 может привести к получению удовлетворительного результата при меньшем количестве членов ряда $S_i^{(1)}$ и, соответственно, к экономии счетного времени. Однако, если требуемая точность окажется недостигнутой, увеличение значений N_k^0 приведет к значительному росту счетного времени. С другой стороны, уменьшение значений N_k^0 может привести к вычислению большего количества членов ряда $S_i^{(1)}$ и, соответственно, к большей точности результата при небольшом счетном времени. Однако, если числа N_k^0 будут слишком малы, может оказаться, что первые члены ряда $S_i^{(1)}$ будут давать слишком грубое приближение интеграла, особенно если подынтегральная функция имеет большие произво-

днее, и это приведет к неоправданному увеличению счетного времени.

Для облегчения процесса подбора величин N_k^0 , а также для получения информации о ходе вычисления интеграла в программе была предусмотрена возможность вывода промежуточных значений интеграла $S_i^{(j)}$ по мере их вычисления.

3. Примеры

Ниже приводятся несколько примеров использования данной программы. Для сравнения даются результаты, полученные с использованием стандартной программы МИКОР, вычисляющей кратные интегралы методом Коровова, а также результаты, полученные при помощи программы, в которой кратный интеграл считался как повторный путем последовательного применения стандартной программы СИМПС, вычисляющей одномерные интегралы по формуле Симпсона с автоматическим выбором шага интегрирования. Подынтегральные функции нормированы так, чтобы точное значение интеграла равнялось единице. Для каждого метода приводятся фактическое значение погрешности ER, равное модулю разности между точным и приближенным значениями интеграла, и среднее счетное время ЭВМ τ в секундах. Для метода Ромберга в качестве результата бралось наилучшее достигнутое значение интеграла при начальных шагах разбиений $N_k^0 = 1, k = 1, \dots, p$. Все вычисления производились на ЭВМ VAX-8350.

В таблицах 1 и 2 показаны результаты вычисления интеграла

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p x_n^5 dx_1 \dots dx_p$$

при кратностях $p = 2, \dots, 6$ и заданной погрешности $\epsilon_{отн} = 0.01$ и $\epsilon_{отн} = 10^{-7}$ соответственно.

Таблица 1

p	Метод Ромберга		SIMPS		МИКОР	
	ER	τ	ER	τ	ER	τ
2	$< 10^{-12}$	1.0	0.5×10^{-3}	0.8	0.7×10^{-2}	0.8
3	$< 10^{-12}$	1.0	0.3×10^{-3}	0.9	0.4×10^{-3}	0.8
4	$< 10^{-12}$	1.1	0.3×10^{-3}	8.6	0.6×10^{-2}	0.8
5	$< 10^{-12}$	1.4			0.7×10^{-2}	1.4
6	$< 10^{-12}$	2.6			0.1×10^{-2}	1.7

Таблица 2

p	Метод Ромберга		SIMPS		МИКОР	
	ER	τ	ER	τ	ER	τ
2	$< 10^{-12}$	1.0	0.1×10^{-6}	1.4	0.1×10^{-7}	0.8
3	$< 10^{-12}$	1.0	0.2×10^{-6}	107.	0.2×10^{-7}	1.3
4	$< 10^{-12}$	1.4			0.5×10^{-7}	7.3
5	$< 10^{-12}$	5.5			0.2×10^{-6}	39.5
6	$< 10^{-12}$	47.			0.6×10^{-6}	234.

Как видно из таблиц 1,2, метод Ромберга дает высокую точность вычислений. Это показывает эффективность данного метода при интегрировании степенных функций.

В таблицах 3 и 4 представлены результаты вычисления интеграла

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 \exp\left(\sum_{n=1}^p x_n\right) / (e-1)^p dx_1 \dots dx_p$$

при $\epsilon_{отн} = 0.01$ и $\epsilon_{отн} = 10^{-7}$ соответственно.

Таблица 3

p	Метод Ромберга		SIMPS		МИКОР	
	ER	τ	ER	τ	ER	τ
2	0.3×10^{-5}	1.0	0.4×10^{-5}	0.7	0.2×10^{-2}	0.8
3	0.4×10^{-6}	1.0	0.7×10^{-5}	0.8	0.5×10^{-2}	0.8
4	0.2×10^{-4}	1.1	0.7×10^{-5}	1.4	0.3×10^{-2}	0.8
5	0.6×10^{-4}	1.4			0.2×10^{-2}	1.0
6	0.1×10^{-3}	2.9			0.8×10^{-2}	1.0

Таблица 4

p	Метод Ромберга		SIMPS		МИКОР	
	ER	τ	ER	τ	ER	τ
2	0.1×10^{-8}	0.9	0.7×10^{-7}	0.9	0.1×10^{-7}	0.8
3	0.2×10^{-8}	1.1	0.1×10^{-6}	9.7	0.2×10^{-8}	2.2
4	0.3×10^{-12}	11.3			0.3×10^{-7}	11.1
5	0.2×10^{-11}	173.			0.3×10^{-7}	63.
6	0.4×10^{-11}	2806.			0.2×10^{-7}	205.

Полученные результаты показывают, что при интегрировании методом Ромберга фактическая достигнутая точность результатов значительно выше требуемой. Попытка увеличить начальные числа разбиений N_k^0 приводит к увеличению счетного времени.

Значительное в ряде случаев превышение требуемой точности можно считать недостатком метода Ромберга, поскольку при этом нерационально используются ресурсы ЭВМ, что отрицательно сказывается на счетном времени.

Известно [1], что применение приближенных формул высокого порядка точности не всегда дает преимущество в сравнении с использованием формул меньшего порядка точности. Поэтому непосредственное применение метода Ромберга в таких случаях может быть нецелесообразно. Тем не менее подходящий выбор начальных чисел разбиений N_k^0 позволяет получить результат с хорошей точностью.

В таблице 5 показаны результаты вычисления интеграла

$$\int_0^\infty \dots \int_0^\infty \prod_{n=1}^p \exp(x_n)^{-2} \cos x_n dx_1 \dots dx_p$$

при заданной погрешности $\epsilon_{\text{абс}} = 10^{-4}$. Сравнение результатов здесь производится с известным точным ответом, равным $(\sqrt{\pi}/(2e^4))^p$. Бесконечные верхние пределы интегрирования заменены значениями, равными 3.5. В вычислениях по программе, использующей метод Ромберга, в качестве результата бралось значение, удовлетворяющее условию (13). При этом числа $N_k^0 = 4$, $k = 1, \dots, p$ выбраны таким образом, чтобы условие (13) выполнялось для первых же приближенных значений $S_0^{(1)}$ и $S_1^{(1)}$, что соответствует интегрированию по p -мерной формуле трапеций (2).

Таблица 5

p	Метод Ромберга		SIMPS		MIKOR	
	ER	τ	ER	τ	ER	τ
2	0.1×10^{-5}	0.9	0.5×10^{-5}	0.9	0.2×10^{-5}	0.9
3	0.2×10^{-5}	1.1	0.8×10^{-6}	2.1	0.2×10^{-5}	1.2
4	0.1×10^{-5}	1.8	0.3×10^{-5}	26.	0.3×10^{-4}	3.5
5	0.1×10^{-5}	9.6			0.3×10^{-4}	27.
6	0.1×10^{-5}	88.			0.7×10^{-3}	47.

Следующий пример имеет физическое содержание и характерен тем, что в расчетах задействуются "граничные" кратности $p = 2, 6$, что позволяет выявить предельные возможности метода Ромберга.

Вычислялась энергия взаимодействия двух ядер, определяемая как сумма ядерного, кулоновского и центробежного потенциалов [3]:

$$U(r) = U_{\text{яд}}(r) + U_{\text{кул}}(r) + U_{\text{цент}}(r).$$

Здесь r - расстояние между центрами двух недеформированных ядер.

Вычисление потенциальной энергии двойных ядерных систем является актуальной задачей при рассмотрении глубоконеупругих столкновений тяжелых ионов.

В данном примере находилась энергия взаимодействия ядер аргона ^{40}Ag и золота ^{197}Au . Предполагалось, что полный угловой момент этой системы равен нулю. При этом равен нулю и центробежный потенциал $U_{\text{цент}}(r)$ [3].

Для определения ядерной части потенциала необходимо было вычислить двойной интеграл, зависящий от параметра r :

$$\int_0^{R_1+R_2} \int_0^\pi F_1(\rho) F_2(\rho, \theta) [q_1(F_1(\rho) + F_2(\rho, \theta)) + q_2] d\rho d\theta,$$

$$\text{где } F_1(\rho) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\rho - R_1}{d}\right)}, F_2(\rho, \theta) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\sqrt{\rho^2 + r^2 - 2\rho r \cos\theta} - R_2}{d}\right)},$$

q_1, q_2, d - некоторые параметры, R_1, R_2 - радиусы ядер.

В таблице 6 показаны результаты расчетов ядерной части потенциала. Задаваемая погрешность $\epsilon_{\text{отн}} = 10^{-3}$, начальные разбиения $N_k^0 = 8$ по обоим переменным ρ и θ . В качестве результата бралось наилучшее достигнутое значение. Для сравнения приводятся результаты, полученные путем последовательного применения стандартной программы SIMPS.

Таблица 6

$r, \text{фм}$	$U_{\text{яд}}(r), \text{МэВ}$	$U_{\text{яд}}(r), \text{МэВ [SIMPS]}$
10.37	-39.90	-39.94
10.77	-33.95	-33.97
11.17	-25.73	-25.74
11.57	-17.94	-17.94
11.97	-11.76	-11.75
12.37	-7.34	-7.33
12.77	-4.41	-4.41
13.17	-2.57	-2.57
13.57	-1.47	-1.47
13.97	-0.82	-0.82

Как видно из таблицы 6, в обоих случаях результаты в пределах погрешности совпадают. Счетное время при вычислениях по методу Ромберга составило 0.13 с на точку, при применении программы SIMPS - 0.35 с на точку.

Для определения кулоновской части потенциала вычислялся 6 - кратный интеграл

$$\int \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2,$$

который в сферических координатах имеет следующий вид :

$$\int_0^{R_1} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{R_2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\rho_1^2 \rho_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2 d\rho_1 d\theta_1 d\varphi_1 d\rho_2 d\theta_2 d\varphi_2}{\sqrt{r^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2Q(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2, \varphi_1, \varphi_2, r)}},$$

$$Q(\dots) = \rho_1 \rho_2 (\sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos\theta_1 \cos\theta_2 - r(\rho_1 \cos\theta_1 - \rho_2 \cos\theta_2)).$$

Значения параметра r выбраны таким образом, чтобы выполнялось условие $r > R_1 + R_2$. Вследствие этого знаменатель в выражении для кулоновского потенциала не обращается в нуль ни при каких значениях переменных интегрирования.

Результаты вычислений этого интеграла при заданной погрешности $\epsilon_{\text{отн}} = 0.01$ показаны в таблице 7. В данном случае использовалась возможность раздельного задания начальных чисел разбиения по каждой переменной. По переменным φ_1 и φ_2 $N^0 = 1$, по остальным переменным $N^0 = 2$. В качестве результата бралось наилучшее достигнутое значение. Для сравнения приводятся результаты, полученные с использованием стандартной программы MIKOR при заданной погрешности $\epsilon_{\text{отн}} = 10^{-3}$.

Таблица 7

$r, \text{фм}$	$U_{\text{кул}}(r), \text{МэВ}$	$U_{\text{кул}}(r), \text{МэВ [MIKOR]}$
10.37	197.2	197.3
10.77	189.9	190.0
11.17	183.2	183.2
11.57	176.9	176.9
11.97	171.0	171.0
12.37	165.5	165.4
12.77	160.4	160.3
13.17	155.5	155.4
13.57	150.9	150.8
13.97	146.6	146.6

Счетное время при вычислениях по методу Ромберга составило 12.8 с на точку, при использовании программы MIKOR - 4.5 с на точку.

Из таблицы 7 видно, что в обоих случаях результаты сравнимы. При этом результаты, полученные методом Ромберга, практически удовлетворяют точности, на порядок выше требуемой. Дальнейшее увеличение задаваемой точности приводит к значительному росту счетного времени.

Результаты вычисления этого интеграла показывают, что при кратности $p = 6$ метод Ромберга может использоваться тогда, когда не требуется большая точность вычислений или вычисление большого количества однотипных интегралов. В противном случае предпочтительнее использовать методы для вычисления интегралов высокой кратности.

Следует заметить, что программа MIKOR, являясь эффективным средством вычисления кратных интегралов, в ряде случаев требует задания некоторых специфических параметров метода вычисления, подбор которых может представлять собой самостоятельную проблему. Поэтому при небольшой кратности интегралов часто целесообразнее использовать более простые методы вычислений.

Вычисление кратных интегралов методом Ромберга предполагает задание только начальных чисел разбиений по переменным. Выбор этих чисел, хотя и связан со спецификой метода, учитывает также свойства подынтегральной функции и имеет наглядный смысл для пользователя.

Заключение

Анализ полученных данных позволяет сделать вывод о том, что предложенный метод наиболее эффективен в случаях, когда кратность вычисляемых интегралов находится в промежутке от трех до пяти, т.е. в переходной области между интегралами низкой и высокой кратности. Достоинствами данного метода являются его простота и высокая точность вычислений. К недостаткам можно отнести завышение в некоторых случаях точности вычислений и связанное с этим возрастание счетного времени.

Метод Ромберга может рассматриваться как эффективное средство вычисления интегралов промежуточной кратности и как дополнение к существующим методам вычисления кратных интегралов.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант No 95-01-01467.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.С.Бахвалов, Численные методы. Часть 1. Москва, "Наука", 1973
2. В.И.Крылов, Приближенное вычисление интегралов. Москва, "Наука", 1967
3. Г.Г.Адамян и др. // *Ядерная физика* 1994, т.57, с.1942

Рукопись поступила в издательский отдел
7 декабря 1995 года.