Х.Гулд, Я.Тобочник

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ: ЧАСТЬ 2.

Книга авторов из США предназначена для обучения читателя моделированию физических экспериментов на компьютере (и тем самым обучению физике). Все главы второй части связаны со статистической физикой и квантовой механикой. Каждая глава содержит теоретический материал, методы решения соответствующих задач, тексты программ, задачи и контрольные вопросы. В основном изложении используется TRUE BASIC, в приложении программы приведены на Паскале и Фортране-77; здесь же дан справочный материал, облегчающий перенос программ на различные модели компьютеров. Может служить учебным пособием.

Для студентов физических и технических вузов, аспирантов, преподавателей физики, молодых специалистов.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

10

В этой главе иллюстрируется применение методов Монте-Карло и простых классических методов для численной оценки определенных интегралов.

10.1. ПРОСТЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Основной целью этой главы является ознакомление с методами Монте-Карло на примере задачи вычисления определенных интегралов. Однако, чтобы в будущем получить представление о применении метода Монте-Карло для интегрирования, полезно сначала обсудить широко распространенные «классические» методы *численного интегрирования.* Мы увидим, что, хотя эти методы обычно предпочтительны в случае малых размерностей, они практически не годятся для многомерных интегралов и для вычисления последних наиболее пригодны методы Монте-Карло.

Рассмотрим одномерный определенный интеграл вида

$$F = \int_a^b dx\, f(x). \tag{10.1}$$

Для некоторых подынтегральных функций $f(x)$ интеграл в (10.1) можно вычислить аналитически, найти в справочниках или оценить с помощью асимптотических рядов. Однако, большинство общеизвестных функций проинтегрировать таким способом не удается и интегралы от них нужно вычислять численно.

Классические методы численного интегрирования основаны на геометрической интерпретации интеграла (10.1) как площади под графиком функции $f(x)$ в пределах от $x = a$ до $x = b$ (рис. 10.1).

Ось x делится на n равных отрезков длиной Δx, где Δx равно

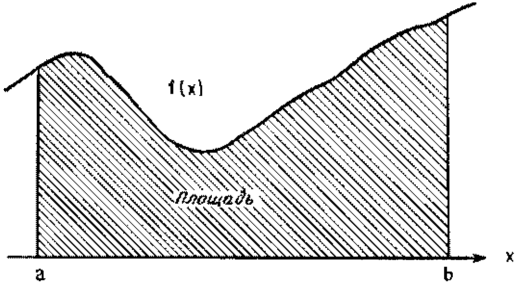

Рис. 10.1. Интеграл F равен площади под кривой $f(x)$.

$$\Delta x = \frac{b-a}{n} \tag{10.2а}$$

и

$$x_n = x_0 + n\Delta x. \tag{10.2б}$$

Для приведенного выше случая $x_0 = a$, а $x_n = b$.

Простейшей оценкой площади под кривой $f(x)$ служит сумма площадей прямоугольников, как показано на рис. 10.2. В обычном методе *прямоугольников* значение $f(x)$ вычисляется в *начале* каждого отрезка и оценка F_n интеграла дается выражением

$$F_n = \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)\Delta x. \tag{10.3}$$

Другим приближением является формула *трапеций*, в которой интеграл оценивается вычислением площади трапеции со сторонами, равными значениям $f(x)$ в начале и конце отрезка. Это приближение эквивалентно замене функции отрезком прямой, соединяющей значения $f(x)$ в начальной и конечной точках отрезка. Поскольку площадь под кривой от точки x_i до x_{i+1} равна $\frac{1}{2}[f(x_{i+1}) + f(x_i)]\Delta x$, то полная площадь F_n определяется выражением

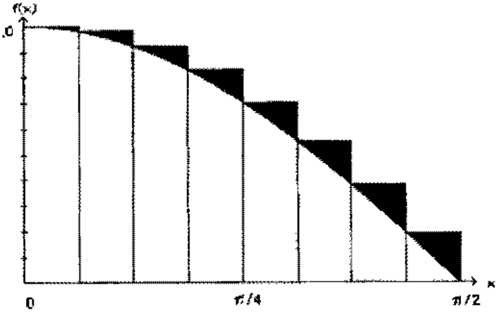

Рис. 10.2. Метод прямоугольников для функции $f(x) = \cos x$ на отрезке $0 \le x \le \pi/2$. Погрешность приближения показана закрашенными фигурами. Численное значение оценки интеграла в случае $n = 8$ приведено в табл. 10.1.

$$F_n = [\tfrac{1}{2} f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \tfrac{1}{2} f(x_n)]\Delta x. \tag{10.4}$$

Обычно более высокую точность обеспечивает использовании квадратичной, или параболической, интерполяции по трем соседним точкам. Например, уравнение полинома второй степени, проходящего через точки (x_0,y_0), (x_1,y_1) и (x_2,y_2), можно записать в виде

$$y(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_2)} +$$

$$+ y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}. \tag{10.5}$$

Чему равно значение $y(x)$ при $x = x_1$? Площадь под параболой $y(x)$ между точками x_0 и x_2 может быть найдена посредством простого интегрирования и выражается формулой

$$F_0 = \frac{1}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)\Delta x, \tag{10.6}$$

где $\Delta x = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$. Полная площадь всех параболических сегментов выражается *формулой Симпсона*:

$$F_n = \frac{1}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \ldots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]\Delta x. \tag{10.7}$$

Обратите внимание на то, что в формуле Симпсона n должно быть четным числом.

ЧИСЛОВОЙ ПРИМЕР

Практически формула Симпсона пригодна для достаточно регулярных функций $f(x)$, т.е. для функций, которые можно аппроксимировать полиномом. Если $f(x)$ является такой «гладкой» функцией, можно вычислить площадь для заданного числа отрезков n, а затем удвоить число отрезков и вновь вычислить эту площадь. Если обе оценки достаточно близки, то вычисления прекращаются. В противном случае можно продолжать удваивать n, до тех пор пока не будет достигнута требуемая точность. Понятно, что данная процедура не будет работать, если функция $f(x)$ не является гладкой.

Можно ли понять заранее, какой из методов, трапеций или Симпсона, окажется лучше? Один способ основан на предположении, что функцию $f(x)$ можно представить полиномом; в этом случае погрешность можно оценить (см. приложение 10А). Однако подчеркнем, что величина погрешности сильно зависит от характера самой функции $f(x)$ и ее поведения на концах отрезка интегрирования и, следовательно, никакой численный метод не может быть универсальным.

Приведем пример программы вычисления интеграла от функции $f(x)$ методом прямоугольников.

```
PROGRAM integ
! вычисляется интеграл от функции f(x) в пределах от x = a до x = b
CALL initial(a,b,h,n)
CALL rectangle(a,b,h,n,area)
CALL output(area)
END

SUB initial(a,b,h,n)
  LET a = 0                              ! нижний предел
  LET b = 0.5*pi                         ! верхний предел
  INPUT prompt "число интервалов = ": n
  LET h = (b - a)/n                      ! шаг интегрирования
END SUB

SUB rectangle(a,b,h,n,area)
  DECLARE DEF f
  LET x = a
  FOR i = 0 to n - 1
    LET sum = sum + f(x)
    LET x = x + h
  NEXT i
  LET area = sum*h
END SUB

SUB output(area)
  PRINT using "####.#######": area
END SUB

DEF f(x) = cos(x)
```

Реализация формулы Симпсона, иллюстрирующая ее связь с формулой трапеций, приводится в нижеследующей подпрограмме, которую нужно подставить в программу integ вместо подпрограммы rectangle.

```
SUB Simpson (a, b, h, n, area)
! приближение Симпсона
  DECLARE DEF f
  LET sumall = f(a) + f(b)
  LET sumall = 0.5*sumall              ! вклад концевых точек
  LET sumeven = sumall                 ! вклад только четных членов
  LET x = a
  FOR i = 1 to n - 1
    LET x = x + h
    LET integrand = f(x)
    LET sumall = sumall + integrand  ! четные и нечетные члены
    LET parity = mod(i, 2)             ! 0 четное число, 1 нечетное число
    IF parity = 0 then LET sumeven = sumeven + integrand
  NEXT i
  LET sum = 4*sumall - 2*sumeven
  LET area = h*sum/3                   ! численная оценка
END SUB
```

Вместо того чтобы на оценивать погрешности различных классических формул, о которых шла речь в разд. 10.1, рассмотрим точность метода прямоугольников для интеграла от функции $f(x) = \cos x$ в пределах от $x = 0$ до $x = \pi/2$. В табл. 10.1 приведены результаты расчетов по программе integ в порядке возрастания n. Как видно из анализа зависимости от n разности между численной оценкой F_n и точным результатом, равным единице, погрешность убывает как $1/n$. Эта наблюдаемая зависимость погрешности от n согласуется с общим результатом, полученным в приложении 10А.

ЗАДАЧА 10.1. Прямоугольное приближение

а. Модифицируйте программу integ так, чтобы можно было наглядно увидеть площадь под кривой $y = f(x)$ и площади прямоугольников (см. рис. 10.2).

б. Используя метод прямоугольников, оцените численно определенные интегралы от функций $f(x) = 2x + 3x^2 + 4x^3$ и $f(x) = e^{-x}$ на

ТАБЛИЦА 10.1. Оценки методом прямоугольников интеграла от функции $\cos x$ на отрезке от $x = 0$ до $x = \pi/2$ в зависимости от числа отрезков n. Погрешность Δ_n равна разности между приближеным значеинем F_n и точным результатом, равным единице. Анализ зависимости Δ_n от n показывает, что Δ_n убывает примерно как $1/n$

n	F_n	Δ_n
2	1.34076	0.34076
4	1.18346	0.18346
8	1.09496	0.09496
16	1.04828	0.04828
32	1.02434	0.02434
64	1.01222	0.01222
128	1.00612	0.00612
256	1.00306	0.00306
512	1.00153	0.00153
1024	1.00077	0.00077

отрезке $0 \le x \le 1$. Как приблизительно зависит погрешность от n в каждом случае?

ЗАДАЧА 10.2. Метод средней точки

а. Одна из распространенных модификаций метода прямоугольников заключается в вычислении $f(x)$ в *средней* точке каждого отрезка. Внесите необходимые изменения в программу **integ** и вычислите интеграл от $\cos x$. Как соотносится величина погрешности с результатами, приведенными в табл. 10.1? Как приблизительно зависит погрешность от n?

б. Используя метод средней точки, оцените определенные интегралы от функций $f(x) = 2x + 3x^2 + 4x^3$ и $f(x) = e^{-x}$ на отрезке $0 \le x \le 1$. Как приблизительно зависит погрешность от n в каждом случае?

ЗАДАЧА 10.3. Формулы трапеций и Симпсона

а. Каким образом можно модифицировать подпрограмму **Simpson** для одновременного получения оценок интеграла от функции $f(x)$ по формулам трапеций и Симпсона?

б. Используя оба метода, оцените численно интегралы от функций $f(x) = 2x + 3x^2 + 4x^3$ и $f(x) = e^{-x}$ на отрезке $0 \le x \le 1$. Как приблизительно зависит погрешность от n в каждом случае? Какой метод приводит к лучшим результатам при одинаковом времени вычислений?

в. Используя формулу Симпсона, оцените значение интеграла от функции $f(x) = (2\pi)^{-1/2}e^{-x^2}$ на отрезках $-1 \le x \le 1$, $-2 \le x \le 2$ и $-3 \le x \le 3$.

г. Используя оба метода, оцените определенный интеграл от функции $f(x) = (1 + x^2)^{-1}$ на отрезках $0 \le x \le 1$ и $0 \le x \le 2$. Какой метод приводит к лучшим результатам? Помните о том, что метод более высокого порядка не всегда дает более высокую точность.

д. Нами уже описана процедура оценки одномерных определенных интегралов, т.е. для выбранной классической формулы интегрирования вычисляются F_n и F_{2n} для приемлемого значения n. Если разность $|F_{2n} - F_n|$ слишком велика, то удваиваем n до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность. Сходится ли последовательность F_n, F_{2n}, ... к истинному значению интеграла F, и если да, то существует ли какой-нибудь способ экстраполяции к пределу? Рассмотрим эту идею на примере формулы трапеций. Поскольку мы нашли, что погрешность этого приближения убывает приблизительно как n^{-2}, то мы вправе записать $F = F_n + Cn^{-2}$. Постройте график оценки F_n в зависимости от n^{-2} и получите экстраполированное значение F. Какие предположения необходимо сделать для того, чтобы процедура экстраполяции была успешной? Примените описанный метод к интегралам, рассмотренным в предыдущих задачах, и сравните полученные результаты с тем, что дают один метод трапеций и метод Симпсона. Более изящно описанная идея воплощена в методе *Ромберга* (см. книгу Пресс и др.).

10.3. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ ИНТЕГРАЛОВ

Многие физические задачи содержат усреднение по многим переменным. Например, предположим, что нам известна зависимость от скорости и координаты полной энергии системы десяти взаимодействующих между собой частиц. Поскольку в трехмерном пространстве каждая частица имеет по три компоненты скорости и координаты, то полная энергия является функцией 60 переменных. Следовательно, для расчета средней энергии, приходящейся на частицу, требуется вычислять $N = 60$-мерный интеграл. Если разделить область изменения каждой координаты на p отрезков, то в данном случае потребуется вычислять сумму по p^{60} точкам. Совершенно очевидно, что для больших значений N применять обычные численные методы нельзя; тем не менее стандартные методы все еще используются для $N = 2-5$.

Дополнительное усложнение в вычисление N-мерных интегралов вносит трудность определения $N-1$ пределов интегрирования. По сравнению с этим границы одномерного интеграла представляются двумя числами: верхним и нижним пределами.

Простейший метод оценки многомерных интегралов заключается в сведении этих интегралов к произведению одномерных интегралов. Данный метод эффективен в случае простых пределов интегрирования и гладких подынтегральных функций. Проиллюстрируем метод на примере двумерного интеграла вида

$$F = \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dx\, dy\, f(x,y). \tag{10.8}$$

Область интегрирования определяется нижним и верхним пределами y при данном значении x, обозначенными соответственно $y_1(x)$ и $y_2(x)$, и нижним и верхним пределами x, обозначенными соответственно x_1 и x_2. Определим функцию $g(x)$ как внутренний интеграл по переменной y:

$$g(x) = \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy\, f(x,y) \tag{10.9}$$

и запишем

$$F = \int_{x_1}^{x_2} dx\, g(x). \tag{10.10}$$

Ниже приводится структура программы двумерного интегрирования. Заметим, что для простоты использован метод прямоугольников.